SÉRIE A, N° 4 181
N° D'ORDRE 5032

THÈSES

présentées

A LA FACULTE DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITE DE PARIS

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR ES SCIENCES PHYSIQUES

par

Janine CORBEAU

1re THESE. - Etude de la diffusion des Rayons X par des monocristaux de silicium de 77 à 580 °K

2e THESE. - Propositions données par la Faculté.

Soutenues le 18 Décembre 1963 devant la Commission d'examen.

MM. WYART . . . . *Président.*
LAVAL . . . . . }
J. P. MATHIEU } *Examinateurs.*
CURIEN . . . . }

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41538126_0056

SÉRIE A, Nº 4 181
Nº D'ORDRE 5032

THÈSES

présentées

A LA FACULTE DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITE DE PARIS

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR ES SCIENCES PHYSIQUES

par

Janine CORBEAU

1re **THESE.** - Etude de la diffusion des Rayons X par des monocristaux de silicium de 77 à 580 °K

2e **THESE.** - Propositions données par la Faculté.

Soutenues le 18 Décembre 1963 devant la Commission d'examen.

MM. WYART . . . . *Président.*
LAVAL . . . . . }
J. P. MATHIEU } *Examinateurs.*
CURIEN . . . . }

R. UNIV. BIBLIOTHEEK LEIDEN

FACULTE DES SCIENCES DE L'UNIVERSITE DE PARIS

-PROFESSEURS-

Doyen .....M. ZAMANSKY

G. JULIA	T	Analyse supérieure et Algèbre supérieure
PRENANT	T	Anatomie et Histologie comparée
GRASSE	T	Evolution des êtres organisés
PREVOST	T	Chimie organique
WYART	T	Minéralo et Cristallo.
TEISSIER	T	Zoologie
MANGENOT	T	Biologie Vég. (Orsay)
AUGER	T	Physique quantique et Relativité
MONNIER	T	Physiologie Générale
PIVETEAU	T	Paléontologie
ROCARD	T	Physique (E.N.S.)
CARTAN	T	Mathématiques.(ENS)
LAFFITTE	T	Chimie générale
FAVARD	T	Géométrie supérieure
COULOMB	T	Physique du Globe
Mle COUSIN	T	Biologie Animale (SPCN)
CHRETIEN	T	Chimie minérale
DRACH	T	Zoologie
KASTLER	T	Physique (E.N.S.)
EPHRUSSI	T	Génétique
RIVIERE	T	Géologie SPCN & Sédim.
GAUTHERET	T	Biologie Vég. (PCB)
LUCAS R.	T	Recherches Physiques
THOMAS A.	T	Biologie cellulaire
ARNULF	T	Optique appliquée
MORAND	T	Physique Enseignement
SOLEILLET	T	Physique (P.C.B.)
FORTIER	T	Mécanique Exp. des Fluides
DANJON	T	Astronomie
PETIT	T	Biologie maritime
QUENEY	T	Météorologie et dynamique atmosphérique
GALLIEN	T	Embryologie
EICHHORN	T	Botanique
DE CUGNAC	T	Biologie Vég. (SPCN)
Mle CAUCHOIS	T	Chimie Physique
THELLIER	T	Physique du Globe
L'HERITIER	T	Biologie Géné. (Orsay)
GRIVET	T	Radioélectricité(Orsay)
PONCIN	T	Mécanique Générale
DUBREIL	T	Arithm.& Théorie des Nombres
QUELET	T	Chimie Organique
CAGNIARD	T	Géophysique appliquée
CHAMPETIER	T	Chimie macromoléculaire
CUVILLIER	T	Micropaléontologie
JUNG	T	Pétrographie
TRILLAT	T	Microscopie et diffraction électronique
WIEMANN	T	Chimie organique & struc.
JACQUINOT	T	Spectroscopie et Physique céleste (Orsay)
VASSY	T	Physique de l'atmosphère
DESTOUCHES	T	Théories Physiques
AMIEL	T	Chimie générale
HOCART	T	Minéralogie et Cristallo.
J.P. MATHIEU	T	Physique Optique
COUTEAUX	T	Biologie animale (P.C.B.)
MAY	T	Zoologie (Orsay)
CHOQUET	T	Théorie des fonctions et Topologie
FELDMANN	T	Biologie Végét. marine
GUINIER	T	Physique des Solides (Orsay)
JOST	T	Physiologie comparée
FORTET	T	Calcul des Probabilités et Physique mathématique
SCHARTZ	T	Calcul diff. et Intégral
CHOUARD	T	Physiologie végétale
MALAVARD	T	Aviation (Techn. Aéronaut.)
BRELOT	T	Calcul diff. et Intégral
NORMANT	T	Chimie organique
BENARD	T	Chimie Minérale
BUVAT	T	Botanique (E.N.S.)
DUGUE	T	Statistiques Mathématiques
SOULAIRAC	T	Psychophysiologie
ULRICH	T	Physiologie végétale
MARECHAL	T	Optique théori. & appliq.
KIRRMANN	T	Théories Chimiques
CHADEFAUD	T	Botanique
Mle LE BRETON	T	Physio.de la nutrition
LELONG	T	Application de l'analyse à la géométrie
DEVILLERS	T	Anatomie et Histol. Comp.
EHRESMANN	T	Topologie Algébrique
FRANÇON	T	Physique (SPCN)
GLANGEAUD	T	Géographie Phys. & Géol. dynamique
GODEMENT	T	Mathématiques (M.P.C.)
PISOT	T	Tech.Mathém. de la Phys.

ROCH	T	Géologie
SCHATZMAN	T	Astrophysique
ZAMANSKY	T	Mathématiques générales
TERMIER	T	Paléontologie stratig.
LENNUIER	T	Physique (M.G.P.)
RIZET	T	Génétique
ROUTHIER	T	Géologie appliquée
Mme TONNELAT	T	Physique théorique
DIXMIER	T	Mathématiques (MPC)
SOUCHAY	T	Chimie générale
AIGRAIN	T	Electrotechnique géné.
BRUSSET	T	Chimie systématique
M. LEVY	T	Physique théorique des hautes énergies (Orsay)
Mme CHAIX	T	Chimie biologique
Mme HUREL-PY	T	Biologie végétale (P.C.B.)
PIAUX	T	Chimie (MPC)
BRUN	T	Mécanique théorique des Fluides
LEDERER	T	Chimie biologique
Mme DUBREIL	T	Mathématique (Agrég.)
Mme LELONG	T	Mathématiques II (ENS)
BELLAIR	T	Géologie (SPCN)
COTTE	T	Physique électricité
DUBOIS J.E	T	Chimie organique
LAMOTTE	T	Zoologie (ENS)
MICHEL A.	T	Chimie minérale (Orsay)
OLMER	T	Energétique générale
ROUAULT	T	Electricité (Orsay)
GAUTHIER	T	Mécanique appliquée
BARCHEWITZ	T	Chimie Physique
BROSSEL	T	Physique atomique
BUSER	T	Physiologie comparée
CAMUS	T	Physiol. Végétale BMPV
CASTAING	T	Physique II Thermod. Orsay
CURIEN	T	Minéralo. & Cristallog.
MOYSE	T	Physiologie végét. Orsay
NOIROT	T	Evolution des Etres Org.
PANNETIER	T	Chimie générale
POSSOMPES	T	Zoologie
PULLMANN	T	Chimie quantique
TEILLAC	T	Physique Nucl. et Radio-activité
TONNELAT	T	Biologie Physico-chim.
VILLE	T	Econométrie
WILLEMART	T	Chimie (P.C.B.)
DODE	T	Chimie (Orsay)
FREYMANN	T	Recherches Physiques
GUINOCHET	T	Biol. vég. SPCN (Orsay)
ROLLET	T	Chimie minérale
Mle JOSIEN	T	Chimie SPCN
CHEVALLEY	T	Géométrie algéb. et théorie des groupes
ARNOULT	T	Electronique (Orsay)
CHAPELLE	T	Physique (Orsay)
DELANGE	T	Mathématiques I (Orsay)
DENY	T	Mathématiques Géné. Orsay
GERMAIN	T	Mécanique théor. des fluides
LUCAS G.	T	Géologie
ALLARD	T	Chimie Physique
BERTHELOT	T	Phys. des particules Fond.
BRICART	T	Météor. et Phys. de l'Atmosphère
Mme ALBE-FESSARD	T	Physiophysiologie solides
FRIEDEL	T	Physiques (Orsay)
M. JULIA	T	Etudes des Moléculaires naturelles complexes
LENDER	T	Biologie Anim. SPCN Orsay
MAGAT	T	Physico-Chimie des radio-éléments
Mle QUINTIN	T	Electrochimie
MONOD	T	Chimie du métabolisme
BENOIT	T	Physiol. anim. (Orsay)
DE POSSEL	T	Analyse numérique
CHARLOT	T	Chimie analytique
LEMEE	T	Physiol. Vég. BMPV (Orsay)
GUERIN	T	Chimie MPC (Orsay)
CHATELET M.	T	Chimie PCB
JEAN	T	Physique Nucléaire Orsay
MATTLER	T	Physique SPCN
BERGERARD	T	Zoologie (Orsay)
BERTEIN	T	Electronique (Orsay)
BOUISSIERES		Chimie des radioélé. (Orsay)
Mme COUTURE	T	Thermodynamique et Méc. Physique
ELLENBERGER	T	Géologie des grandes régions du globe
FRANC	T	Biologie animale PCB
SCHNELL		Botanique tropicale (Orsay)
STOLKOWSKI	T	Physiologie végétale
ACHER		Chimie Biol. (Orsay)
BAUDOIN		Biologie animale PCB
BEAUMONT		Biologie animale SPCN
BLAMONT	T	Géophysique ionosphère
BOURREAU		Botanique
CURIE D.		Physique MGP
DURAND-DELGA	T	Géologie
FREON	T	Chimie organique (Orsay)
HELLER	T	Physiolog. végétale
TORTRAT	T	Calcule des Probabilités
CAILLEUX		Géologie (SPCN)

MAGNAN	T	Physique SPCN
DAUDEL	T	Mécanique ondulatoire appliq. à la chimie Théorique & à la Phys. Nucléaire
Mle FOURCROY	T	Biologie végétale SPCN
Mme CHOQUET-BRUHAT	T	Mécan. Analytique et mécan. céleste
Mle VEIL		Physiologie générale
LWOFF	T	Microbiologie
SIESTRUNCK	T	Mécan. Phys. & Expérim.
LACOMBE	T	Métallurg. des métaux Nucléaires
BROCHARD	T	Physique PCB (Orsay)
CABANNES	T	Mécanique générale
LESIEUR	T	Mathématiques I (Orsay)
MAZET	T	Mécanique générale (Orsay)
CAIRE		Géographie phys. et Géolog. Dynamique
COMOLET	T	Mécanique des fluides
CORABOEUF		Physiologie animale Orsay
DELLOUE		Physique de l'exosphère
GORENFLOT		Botanique II (Orsay)
HOUILLON		Biologie animale PCB
JULLIEN J.		Chimie SPCN (Orsay)
MALGRANGE	T	Technique Math. de la Physique (Orsay)
OLIVIER		Antropologie
NOZERAN	T	Botanique II (Orsay)
BLANC-LAPIERRE	T	Physique ENS (Orsay)
CHEVAUGEON	T	Botanique (Orsay)
KAHANE	T	Mathématiques (Orsay)
SAMUEL	T	Mathémat. ENS féminines
KOURGANOFF	T	Astronomie (Orsay)
THIRY	T	Mécanique céleste
ABELES		Physique SPSCN
AMAT		Physique PCB
AUBOIN		Géologie
Mme BENOIT-GUEUTAL		Physique Nucl. et radioactivité
BOUGIS	T	Biologie marine (Villefranche/mer)
BRUHAT	T	Mathématiques MPC
BRUNN	T	Géologie historique (Orsay)
CHABBAL		Physique MGP (Orsay)
DEHEUVELS	T	Mathématique Propé (Orsay)
D'ESPAGNAT		Physique théorique (Orsay)
FURON		Géologie SPCN
Mme GANS	T	Génétique
GENEVES		Biologie végétale PCB
GUILBERT		Physique (CUS Orléans)
HUPE		Pétrographie
HOLLANDE	T	Biologie général
LIONS	T	Analyse numériqu
MAITTE		Chimie PCB
MEYER		Physique propédeutique
NICOLAS		Géologie appliquée
PANUGEL		Biologie général
RAVIER		Pétrographie
ROSEAU	T	Mécanique théori des Fluides
ROUBINE		Electronique
SILBER	T	Chimie PCB
UEBERSFELD	T	Electronique
YVON	T	Théories physiques

LE SECRETAIRE GENERAL

R. POULLAIN

Ce travail a été effectué au laboratoire attaché à la Chaire de Physique théorique du Collège de France, sous la direction de M. le professeur J. LAVAL, membre de l'Institut. Je le prie de bien vouloir trouver ici l'expression de ma profonde reconnaissance pour la bienveillance et les conseils qu'il n'a cessé de me prodiguer.

Je remercie M. H. Curien, professeur à la Faculté des Sciences de Paris, pour l'intérêt qu'il a toujours porté à mes travaux.

J'exprime ma sincère gratitude à M. N. BOCCARA, chargé de Recherches au C.N.R.S., pour l'aide amicale qu'il m'a apportée en toutes circonstances.

Enfin, je tiens à remercier de leur concours mes collègues ainsi que tout le personnel du laboratoire.

"ETUDE DE LA DIFFUSION DES RAYONS X PAR DES MONOCRISTAUX DE SILICIUM DE 77 A 580° K"

INTRODUCTION

L'objet de ce travail est l'étude de la diffusion faible des rayons X par un cristal de silicium. Cette diffusion, observée en dehors des réflexions sélectives de Bragg, est provoquée par l'agitation thermique et l'effet Compton; son étude permet d'obtenir des renseignements sur les oscillations atomiques dans un cristal et sur la diffusion Compton.

Laval, le premier a fait une étude systématique de la diffusion des rayons X par les cristaux (1) et a montré comment il était possible de remonter des résultats expérimentaux aux fréquences des oscillations atomiques (2). Dès lors, de nombreux travaux ont été consacrés à l'étude de cette diffusion; ils ont été effectués par Olmer (Aluminium 1948), Curien (Fer α, 1952), Cole et Warren (Laiton β, 1952, Chlorure d'Argent, 1953), Joynson (Zinc, 1954), Mériel (Sel gemme, Syvine, 1955), Jacobsen (Cuivre, 1955), Walker (Aluminium, 1956), Cribier (Fluorine, 1956), Champier (Lithium, 1958), Boccara (Sylvine, 1961), Fouret (Antimoine, 1963).

L'intérêt de l'étude de la diffusion des rayons X par le silicium provient du fait que la maille de ce cristal cubique renferme seulement deux atomes, et qui sont de la même sorte; de ce fait il est facile de déterminer les fréquences des oscillations "optiques" de vecteur d'onde faible ou nul.

Dans une première partie nous rappellerons l'essentiel de la dynamique cristalline et nous en ferons l'application au silicium. La seconde partie traitera de la théorie de la diffusion des rayons X. Dans la troisième partie, nous décrirons l'appareillage utilisé, et le principe de l'analyse des résultats expérimentaux. Enfin nous exposerons et discuterons les résultats obtenus.

A - RAPPELS DE DYNAMIQUE DES RESEAUX

Les fréquences des composantes harmoniques de l'agitation thermique sont déterminées par le champ de forces présent dans le cristal. De nombreuses études ont été consacrées à cette question (Born (3), Laval (4)). Nous en rappellerons l'essentiel.

La position instantanée d'un atome est définie par la triple translation $\vec{m} + \vec{j} + \vec{u}^{m}_{j}$; $\vec{m}$ est une translation du réseau cristallin qui transporte l'origine sur le noeud compris dans le motif cristallin où est inclus l'atome ; $\vec{j}$ est un vecteur qui va de ce noeud à la position moyenne de cet atome ; $\vec{u}^{m}_{j}$ est l'élongation de l'oscillation globale accomplie par l'atome autour de sa position moyenne $\vec{m} + \vec{j}$; afin d'abréger, l'atome ainsi défini sera appelé atome m j. (Fig. 1).

De même la position de l'atome pk sera définie par les trois translations $\vec{p} + \vec{k} + \vec{u}^{p}_{k}$. Nous supposerons la loi de Hooke valable ; dans ces conditions, la force globale exercée par tous les atomes du cristal sur l'atome mj a pour expression :

$$F^{m}_{j\,\alpha} = + \sum_{pk} \sum_{\beta} C^{m-p}_{jk\,\alpha\beta}\, u^{\beta}_{p\,k} \quad , (\alpha = 1,2,3,) \; ; \text{ on définit}$$

ainsi des constantes de rappel

$C^{m-p}_{jk\,\alpha\beta}$; elles forment un tenseur d'ordre 2.

Appliquons l'équation fondamentale de la dynamique au mouvement de l'atome mj de masse m_j ; il vient

$$- m_j \ddot{u}^{m}_{\alpha j} + \sum_{pk} \sum_{\beta} C^{m-p}_{jk\,\alpha\beta}\, u^{\beta}_{p\,k} = 0.$$

Si g est le nombre d'atomes du motif cristallin et n le nombre de mailles élémentaires, ces équations différentielles sont au nombre de 3 ng.

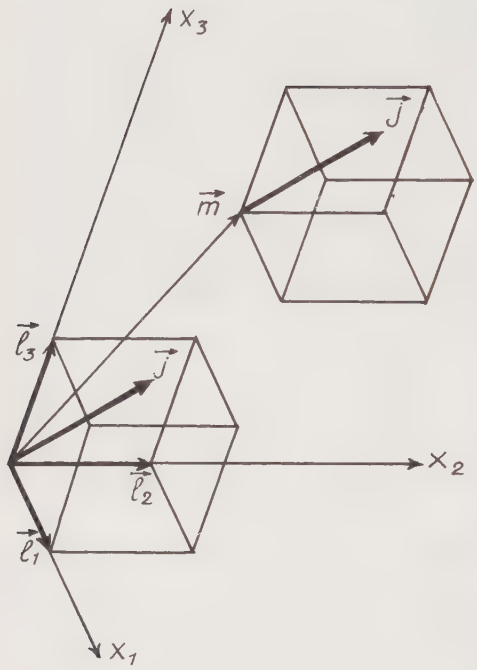
On cherche des solutions sous forme d'ondes harmoniques planes en posant

$$\vec{U}^{m}_{j} = \frac{\vec{\varsigma}_j}{\sqrt{m_j}} \quad \exp.\ i\,2\pi \left[\nu t - \vec{S}(\vec{m}+\vec{j})\right] \; ; \; \vec{\varsigma}_j \text{ est le vecteur}$$

caractérisant l'oscillation accomplie par l'atome en position j dans la maille. $\vec{S}$ est le vecteur d'onde de l'oscillation : $\left|\vec{S}\right| = \left|\frac{I}{\lambda}\right|$. Le système d'équations précédent donne alors :

(1) $\omega^2 \varsigma_{j\alpha} + \sum_{k\beta} \gamma^{jk}_{\alpha\beta} \varsigma^{\beta}_{k} = 0.$ où

$$\gamma^{jk}_{\alpha\beta} = \sum_{m-p} \frac{C^{m-p}_{\alpha\beta\ jk}}{\sqrt{m_j m_k}} \exp i\, 2\pi \vec{S} \left[(\vec{m} + \vec{j}) - (\vec{p} + \vec{k})\right] .$$



Les $\gamma^{jk}_{\alpha\beta}$ sont les éléments d'une matrice hermitienne Γ (matrice de Fourier) ; les équations (1) sont au nombre de 3 g ; elles sont compatibles si :

(2) $\left| \omega^2 I + \Gamma \right| = 0$ où I est la matrice unité et Γ la matrice de Fourier d'ordre 3g x 3g.

L'équation (2) définit 3g fréquences possibles par vecteur d'onde $\vec{S}$. Sur ces 3g oscillations, 3 sont du genre acoustique, leurs fréquence tendent vers zéro avec $\vec{S}$; les 3(g-1) autres sont du genre rapide ou optique, leurs fréquences ne tendent pas vers zéro avec $\vec{S}$;

Les vecteurs $\vec{\varsigma}_j$ qui se rapportent à une même oscillation harmonique ont été appelés par Born vecteurs propres de cette oscillation.

B - APPLICATION AU SILICIUM

1 - Structure du silicium

Le réseau du silicium est un réseau cubique à faces centrées ;

La maille élémentaire est rhomboédrique, elle comprend 2 atomes.

Il est plus commode de se rapporter à la maille cubique représentée sur la figure 2. Cette maille contient 8 atomes : 8 aux sommets du cube, et communs chacun aux 8 cubes contigus, 6 aux centres des faces et communs chacun à 2 cubes, et 4 situés aux centres de 4 des 8 petits cubes d'arête d/2. (fig. 2).

Ière Partie

- APPLICATION de la THEORIE de la DYNAMIQUE CRISTALLINE au SILICIUM -

La longueur de l'arête du cube est égale à 5,431 A°.

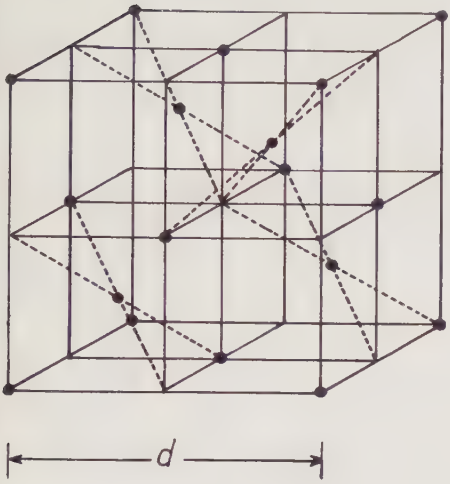


Fig. 2

Le réseau réciproque est cubique centré (fig. 3) ; il est divisible en premières zones de Brillouin, centrées sur chaque noeud du réseau polaire ; Ce sont ici des cuboctaèdres (fig. 4) de volume $4/_d3$.

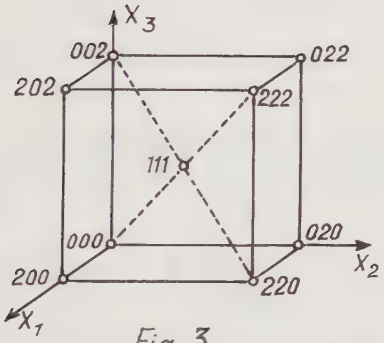


Fig. 3

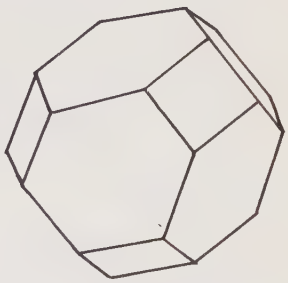


Fig. 4

2 – Matrice de Fourier du Silicium

a) Propriétés des coefficients $C^{m-p}_{\alpha\beta}{}_{jk}$.

Ce sont, aux masses des atomes près, les éléments de la matrice dynamique de Born. Egaux aux dérivés secondes de l'énergie potentielle, ils sont symétriques en m j et pk, et en α et β , l'assise superficielle du cristal négligée. Si l'on ne tient pas compte de la symétrie du cristal, ces coefficients prennent donc six valeurs distinctes ; mais le nombre de ces valeurs distinctes est réduit par la symétrie du cristal.

Nous avons employé la méthode définie par Born et dont l'application pratique a été simplifiée par Boccara (5) pour réduire ces coefficients.

Ainsi, pour un couple d'atomes situé sur un axe de symétrie quaternaire, le tenseur symétrique C $\alpha\beta$ a la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} C_{11} & 0 & 0 \\ 0 & C_{11} & 0 \\ 0 & 0 & C_{33} \end{bmatrix}$$

et pour un couple d'atomes situé sur un axe de symétrie ternaire le tenseur C$\alpha\beta$ est de la forme :

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} \end{bmatrix}$$

b) Formes de la matrice de Fourier du Silicium, dans les cas où le vecteur d'onde $\vec{S}$ est parallèle à un axe de symétrie du cristal.

Elle est composée de quatre sous-matrices $\left[\gamma_{jj}\right]$ et $\left[\gamma_{kk}\right]$ qui sont réelles et égales puisque les deux atomes du motif cristallin sont identiques, et $\left[\gamma_{jk}\right]$ et $\left[\gamma_{kj}\right]$ qui sont complexes conjuguées.

Le motif cristallin du Silicium comprenant deux atomes, la matrice de Fourier est d'ordre 6 x 6.

Lorsque $\vec{S}$ est parallèle à un axe de symétrie du cristal, elle se réduit, et l'équation aux fréquences se décompose en trois équations du second degré.

Si l'on connaît les tenseurs C $\alpha\beta$ relatifs à des couples d'atomes situés sur des axes de symétrie, il est possible d'en déduire les formes de la matrice de Fourier pour des vecteurs $\vec{S}$ dirigés suivant ces mêmes axes de symétrie ; en effet d'après l'égalité

$$\gamma^{jk}_{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{m_j m_k}} \sum_{m-p} C^{m-p}_{\substack{jk \\ \alpha\beta}} \exp i\, 2\pi \vec{S} \left[\vec{m}+\vec{j} - (\vec{p}+\vec{k})\right] ,$$

si l'on effectue l'unee des opérations de symétrie qui laissent le vecteur $\vec{S}$ inchangé, le couple (mj) (pk) se transforme dans le couple (m'j) (p'k) et $C^{m-p}_{\substack{jk \\ \alpha\beta}} = \pm\, C^{m'-p'}_{\substack{jk \\ \gamma\delta}}$, et la matrice de Fourier sera composée de quatre sous-matrices de forme identique à celle des tenseurs $C^{m-p}_{\substack{jk \\ \alpha\beta}}$ correspondants, à condition que le produit scalaire $\vec{S}\left[\vec{m}+\vec{j} - (\vec{p}+\vec{k})\right]$ se conserve dans l'opération de symétrie.

C - APPLICATIONS

Nous étudierons les oscillations thermiques se propageant suivant les axes de symétrie ternaire et quaternaire ; suivant ces axes, les oscillations sont purement longitudinales ou transversales et les oscillations transversales sont dégénérées (6).

α) $\vec{S}$ est parallèle à l'axe de symétrie ternaire.

Le produit scalaire $\vec{S}\left[\vec{m}+\vec{j}-(\vec{p}+\vec{k})\right]$ se conserve dans l'opération de symétrie autour de cet axe ; et la matrice de Fourier prend la forme suivante :

$$\left[\gamma\right] = \begin{bmatrix} A & B & B & C & D & D \\ B & A & B & D & C & D \\ B & B & A & D & D & C \\ C^* & D^* & D^* & A & B & B \\ D^* & C^* & D^* & B & A & B \\ D^* & D^* & C^* & B & B & A \end{bmatrix}$$

L'équation aux fréquences se décompose en

$$(\omega^2 + A + 2B)^2 - (C + 2D)\ (C^* + 2D^*) = 0\ ,$$

donnant les fréquences des ondes acoustiques et optiques longitudinales, et

$$(\omega^2 + A - B)^2 - (D-C)\ (D^* - C^*) = 0,$$

donnant les fréquences des ondes acoustiques et optiques transversales ; les rapports des vecteurs propres sont :

pour les oscillations longitudinales

$$\frac{\xi_j}{\xi_k} = -\frac{C + 2D}{A + \omega^2 + 2B} = -\frac{A + \omega^2 + 2B}{C^* + 2D^*}$$

et pour les oscillations transversales

$$\frac{\xi_j}{\xi_k} = -\frac{D - C}{-(\omega^2 + A) + B} = -\frac{-(\omega^2 + A) + B}{D^* - C^*}$$; on peut donc les mettre sous la forme suivante :

$$\frac{\xi_j}{\xi_k} = \pm e^{i\eta}$$, η étant la phase de l'atome indexé k par rapport à celle de l'atome indexé j.

β) $\vec{S}$ est parallèle à l'axe de symétrie quaternaire inverse.

L'axe de symétrie quaternaire étant hélicoïdal, le produit scalaire $\vec{S}\left[\vec{m}+\vec{j}-(\vec{p}+\vec{k})\right]$ se conserve dans la rotation directe autour de cet axe à condition qu'il ne fasse intervenir que des atomes appartenant au même sous-réseau, c'est-à-dire à condition que j soit identique à k ; c'est le cas des sous-matrices $\left[\gamma_{jj}\right]$ et $\left[\gamma_{kk}\right]$, qui auront donc la forme des tenseurs $C^{\alpha\beta}$ relatifs à un couple d'atomes situé sur l'axe

quaternaire ; au contraire, pour les matrices $[\gamma_{jk}]$ et $[\gamma_{kj}]$, où interviennent des atomes de type différent, le produit scalaire ne se conserve pas dans la rotation directe autour de l'axe de symétrie et les sous matrices ont la forme générale des tenseurs $C\ \alpha\beta$ relatifs à un couple d'atomes de coordonnées $\alpha 00$ soit :

$$\begin{bmatrix} C_{11} & 0 & 0 \\ 0 & C_{22} & C_{23} \\ 0 & C_{23} & C_{22} \end{bmatrix}$$

Ainsi, la matrice de Fourier prend la forme suivante :

$$[\gamma] = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 & G & 0 & 0 \\ 0 & A' & 0 & 0 & H & I \\ 0 & 0 & A' & 0 & I & H \\ G^* & 0 & 0 & A & 0 & 0 \\ 0 & H^* & I^* & 0 & A' & 0 \\ 0 & I^* & H^* & 0 & 0 & A' \end{bmatrix}$$

L'équation aux fréquences se décompose en

$(A + \omega^2)^2 - G^2 = 0$ (ondes longitudinales) et

$(A' + \omega^2)^2 - (H + I)(H^* + I^*) = 0$ (ondes transversales).

et les rapports des vecteurs propres sont :

pour les longitudinales :

$$\frac{\xi_j}{\xi_k} = -\frac{G}{A+\omega^2} = -\frac{A+\omega^2}{G} = \pm 1$$: les oscillations sont toujours en phase, ou en opposition de phase, indépendemment de S.

et pour les transversales :

$$\frac{\xi_j}{\xi_k} = -\frac{I + H}{\omega^2 + A'} = -\frac{\omega^2 + A'}{I^* + H^*} \quad ;$$

ce rapport est de la forme

$$\frac{\xi_j}{\xi_k} = \pm e^{i\eta}$$

3 - Etude d'un champ de forces simplifié du silicium

a) hypothèse simplificatrice

La matrice de Fourier n'est déterminée que si les coefficients $C^{m-p}_{\alpha\beta\ jk}$ sont connus. Pour calculer ces coefficients à partir des données expérimentales, nous ferons des hypothèses simplificatrices.

Nous décrirons d'abord le champ de forces à l'intérieur du cristal par un champ tensoriel soumis uniquement à la symétrie du milieu cristallin et rapidement décroissant avec la distance. Il est dû aux forces de

répulsion provenant de la pénétration mutuelle des atomes et aux forces de Van der Waals entre atomes très proches voisins.

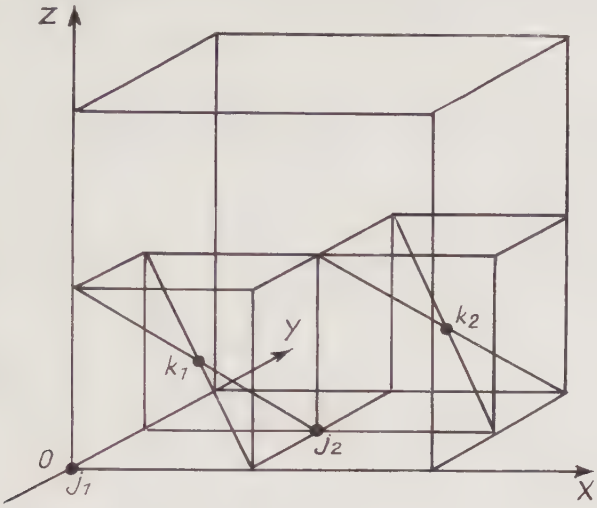


Fig. 5

Un atome j_1 de silicium est entouré de 4 premiers voisins k_1 qui sont à la distance $\frac{d\sqrt{3}}{4}$ de l'atome origine j_1 sur les axes ternaires du cristal ; ce même atome j_1 est entouré de 12 seconds voisins j_2 situés sur les axes binaires et à la distance $\frac{d\sqrt{2}}{2}$ de l'atome j_1 ; il est entouré ensuite de 12 troisièmes voisins k_2 situés à la distance $\frac{d\sqrt{19}}{4}$ de l'atome j_1.

Prenons les axes de coordonnées dirigés suivant les axes de symétrie quaternaires (Fig. 5). Les tenseurs $C^{m-p}_{\substack{jk \\ \alpha\beta}}$ relatifs aux 1ers, 2ds et 3èmes voisins ont respectivement la forme :

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & \beta_1 \\ \beta_1 & \beta_1 & \beta_1 \\ \beta_1 & \beta_1 & \alpha_1 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \alpha_2 & \gamma_2 & 0 \\ \gamma_2 & \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_2 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \alpha_3 & \gamma_3 & \delta_3 \\ \gamma_3 & \alpha_3 & \delta_3 \\ \delta_3 & \delta_3 & \beta_3 \end{bmatrix}$$

On voit donc que, en tenant pour négligeable dans la partie tensorielle du champ de forces l'action des voisins plus éloignés que les troisièmes, il faut connaître neuf coefficients pour rendre compte des actions qui s'exercent entre un atome et ses vingt-huit premiers voisins. L'hypothèse suivante va nous permettre de réduire à quatre ces coefficients :

On admettra que les forces s'exerçant entre un atome et ses voisins sont centrales, à partir des seconds voisins, ce qui entraîne :

$\gamma_2 = \alpha_2 \quad \beta_2 = 0$ pour les 2e voisins ; $\gamma_3 = \alpha_3 \quad \delta_3 = 3\alpha_3 \quad \beta_3 = 9\alpha_3$ pour les 3e voisins

Donnons dans cette hypothèse les expressions des éléments de la matrice de Fourier dans les deux cas où $\vec{S}$ est dirigé suivant les axes de symétrie ternaire et quaternaire.

Nous poserons $\pi \vec{Sd} = \vec{\sigma}$ de composantes σ_1 , σ_2 , σ_3 ;

- $\vec{S}$ parallèle à l'axe de symétrie ternaire.

Les composantes de $\pi \vec{Sd}$ sont égales : $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma$.

La matrice de Fourier est déterminée lorsqu'on en connaît les quatre éléments suivants :

$$\gamma^{11}_{11} = A = \frac{-4}{m}\left[\alpha_2(1-\cos 2\sigma) + \alpha_1 + 11\alpha_3\right]$$ (m: masse de l'atome de silicium)

$$\gamma^{11}_{12} = B = \frac{2\alpha_2}{m}(\cos 2\sigma - 1)$$

$$\gamma^{12}_{11} = C = \frac{1}{m}\left[e^{\frac{-i3\sigma}{2}}(\alpha_1 + 22\alpha_3) + e^{\frac{i\sigma}{2}}(3\alpha_1 + 11\alpha_3) + 11\alpha_3 e^{\frac{i5\sigma}{2}}\right]$$

$$\gamma^{12}_{12} = D = \frac{1}{m}\left[e^{\frac{-i3\sigma}{2}}(\beta_1 - 2\alpha_3) + e^{\frac{i\sigma}{2}}(-\beta_1 - 5\alpha_3) + 7\alpha_3 e^{\frac{i5\sigma}{2}}\right]$$

- $\vec{S}$ parallèle à l'axe de symétrie quaternaire

Les composants de $\pi \vec{Sd}$ sont σ, 0 , 0 . La matrice de Fourier est déterminée par ses cinq éléments suivants :

$$\gamma^{11}_{11} = A = \frac{4}{m}\left[2\alpha_2(\cos\sigma - 1) - \alpha_1 - 11\alpha_3\right]$$

$$\gamma^{11}_{22} = A' = \frac{4}{m}\left[\alpha_2(\cos\sigma - 1) - \alpha_1 - 11\alpha_3\right]$$

$$\gamma^{12}_{11} = G = \frac{4}{m}\left[(\alpha_1 + 2\alpha_3)\cos\frac{\sigma}{2} + 9\alpha_3\cos\frac{3\sigma}{2}\right]$$

$$\gamma^{12}_{22} = H = \frac{4}{m}\left[(\alpha_1 + 10\alpha_3)\cos\frac{\sigma}{2} + \alpha_3\cos\frac{3\sigma}{2}\right]$$

$$\gamma^{12}_{23} = I = \frac{4i}{m}\left[(6\alpha_3 - \beta_1)\sin\frac{\sigma}{2} + \alpha_3\sin\frac{3\sigma}{2}\right]$$

On obtient alors les courbes de dispersion des fréquences en fonction du vecteur d'onde $\vec{S}$, ainsi que les rapports des vecteurs propres des oscillations correspondantes, en fonction des 4 coefficients α_1, β_1, α_2, α_3, dans le cas où $\vec{S}$ est dirigé suivant les axes de symétrie ternaire et quaternaire.

b) Résultats numériques et courbes de dispersion

Nous pouvons calculer les coefficients α_1, β_1, α_2, α_3 à partir des données expérimentales suivantes :

- les trois coefficients d'élasticité, mesurés à 293° K (7) :

$C_{11} = 1{,}674 \cdot 10^{12}$ dynes. cm^{-2}

$C_{12} = 0{,}652 \cdot 10^{12}$ "

$C_{44} = 0{,}796 \cdot 10^{12}$ "

- la fréquence principale des oscillations rapides ; la photométrie des rayons X diffusés relative au noeud 600 du réseau polaire, donne directement cette fréquence ν_o sans hypothèse préalable sur le champ de forces. J'ai trouvé, $\nu_o = 15,7 \cdot 10^{12}\ s^{-1}$.

On obtient trois relations entre les coefficients $\alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \alpha_3$ et les constantes élastiques en calculant les vitesses de propagation des ondes acoustiques suivant les axes de symétrie quaternaire et ternaire à l'aide de la matrice de Fourier et en identifiant avec les vitesses données par la théorie de l'élasticité. La quatrième relation s'obtient à partir de l'expression de l'oscillation optique principale donnée par la matrice de Fourier.

La résolution du système

$$dc_{11} = \alpha_1 + 8\ \alpha_2 + 83\ \alpha_3$$

$$dc_{44} = \alpha_1 + 4\ \alpha_2 + 19\ \alpha_3 - \frac{(9\alpha_3 - \beta_1)^2}{\alpha_1 + 11\alpha_3}$$

$$dc_{12} = -\alpha_1 + 2\ \beta_1 + 4\ \alpha_2 + 19\ \alpha_3$$

$$4\ \pi^2 \nu_o^2 = \frac{8}{m}(\alpha_1 + 11\ \alpha_3)$$

m : masse de l'atome de silicium : $0,466 \cdot 10^{-22}$ g

d : arête de la maille cubique du silicium : 5,431 A°

donne les valeurs suivantes des coefficients :

$$\alpha_1 = 5,35 \cdot 10^4 \text{ dynes.cm}^{-1}$$

$$\beta_1 = 3,83 \cdot 10^4 \text{ dynes.cm}^{-1}$$

$$\alpha_2 = 0,171 \cdot 10^4 \text{ dynes.cm}^{-1}$$

$$\alpha_3 = 0,0029 \cdot 10^4 \text{ dynes.cm}^{-1}$$

On peut alors résoudre les équations aux fréquences en fonction du vecteur d'onde $\vec{S}$.

Les figures 6 et 7 représentent les courbes de dispersion des fréquences des oscillations thermiques se propageant suivant les axes de symétrie ternaire et quaternaire. Les valeurs numériques des fréquences sont rassemblées dans les tableaux suivants :

- fréquences des oscillations pilotées par un vecteur d'onde $\vec{S}$ parallèle à l'axe de symétrie quaternaire :

S	$\nu_{AL} \cdot 10^{12}$ s	$\nu_{OL} \cdot 10^{-12}$ s	$\nu_{AT} \cdot 10^{-12}$ s	$\nu_{OT} \cdot 10^{-12}$ s
0	0	15,7	0	15,7
1/6	2,60	15,5	1,77	15,6
1/3	5,0	15,1	3,4	15,4
1/2	7,2	14,5	4,9	15,2
2/3	9,0	13,7	6,1	14,9
5/6	10,5	12,8	6,8	14,6
1	11,7	11,7	7,1	14,5

AL et OL désignent respectivement les oscillations longitudinales acoustiques et optiques et AT et OT respectivement les oscillations transversales acoustiques et optiques.

- Fréquence des oscillations pilotées par un vecteur d'onde $\vec{S}$ parallèle à l'axe de symétrie ternaire.

S	$\nu_{AL} \cdot 10^{-12}$ s	$\nu_{OL} \cdot 10^{-12}$ s	$\nu_{AT} \cdot 10^{-12}$ s	$\nu_{OT} \cdot 10^{-12}$ s
0	0	15,7	0	15,7
1/12	2,50	15,6	1,35	15,6
1/6	4,8	15,2	2,7	15,5
1/4	6,9	14,6	3,7	15,4
1/3	8,6	14,0	4,6	15,2
5/12	9,8	13,3	5,1	15,1
1/2	10,3	13,0	5,3	15,0

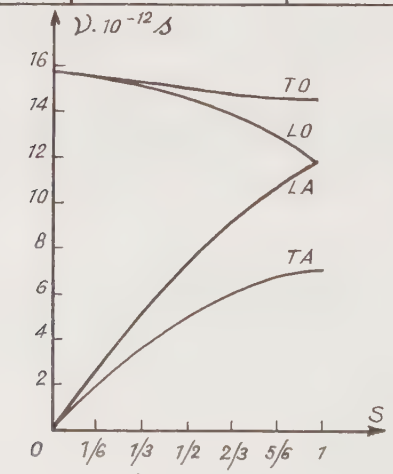


Fig. 6 : $\vec{S}$ parallèle à [100]

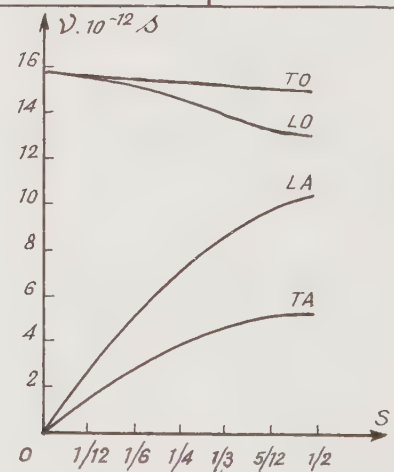


Fig. 7 : $\vec{S}$ parallèle à [111]

(Courbes de dispersion des fréquences calculées d'après le modèle de Born et Von Karman.)

4 - Champ de forces tenant compte de la polarisation des atomes

Dans l'étude précédente du champ de forces cristallin du silicium, nous avons utilisé l'approximation de Born et Von Karman qui prend en compte uniquement les forces agissant à courte distance entre des atomes envisagés ponctuels (lesquels en fait oscillent comme des blocs rigides sauf en périphérie ; ainsi le mouvement de chacun de leurs points est le même que celui de leur centre de gravité).

Cependant, l'étude de l'absorption des rayonnements infra-rouges dans le silicium (8) (9) a montré l'existence de moments dipolaires résultant de la déformation de la distribution électronique des atomes.

Mashkevich et Tolpygo (10), les premiers, ont tenu compte des intéractions dipolaires dans l'étude du champ de forces des cristaux homopolaires du type silicium ; ils expriment l'énergie d'un tel cristal comme une fonction quadratique des déplacements des noyaux et des moments dipolaires des atomes, et négligent l'effet des multipoles électriques d'ordre supérieur à deux ; cette approximation est appelée approximation dipolaire.

L'étude a été poursuivie par Demidenko et Kucher, qui ont calculé les fréquences des oscillations thermiques se propageant suivant les axes de symétrie dans le germanium (11) et le silicium (12) ; six paramètres leur sont nécessaires pour déterminer ces fréquences :

- deux représentent les interactions des atomes non polarisés ; ils correspondent à l'approximation de Born et Von Karman, lorsqu'on prend en compte les forces agissant entre un atome et ses premiers voisins.

- deux représentent l'action d'un atome polarisé sur un atome non polarisé.

- deux enfin représentent les interactions de deux atomes polarisés.

Ainsi, six données expérimentales sont nécessaires à la détermination des fréquences : on peut prendre les trois coefficients d'élasticité, la fréquence principale et les deux fréquences des oscillations transversales acoustiques, de vecteur d'onde fondamental maximum, qui se propagent suivant les axes de symétrie ternaire et quaternaire ;

Les divergences entre les courbes de dispersion calculées dans cette approximation dipolaire et celles obtenues dans l'approximation des atomes ponctuels, lorsqu'on prend en compte les interactions exercées entre un atome et ses 1ers, 2es et 3es voisins, sont importantes pour les oscillations transversales acoustiques, où elles atteignent 50 %.

D'autre part, les courbes de dispersion calculées par Demidenko, Kucher et Tolpygo sont généralement en bon accord avec les valeurs des

fréquences mesurées par Brockhouse et Iyengar (13)(14) grâce à la diffusio des neutrons ; il existe seulement un écart sensible (10 % environ) pour les fréquences des oscillations longitudinales acoustiques se propageant suivant l'axe de symétrie ternaire.

Afin d'améliorer leur accord avec les résultats expérimentaux, Demidenko, Kucher, et Tolpygo, prennent en compte les forces agissant à courte distance entre un atome et ses seconds voisins ; deux paramètres supplémentaires leur sont nécessaires pour tenir compte de ces interaction ils obtiennent alors un très bon accord avec les résultats expérimentaux, mais huit paramètres entrent finalement dans les expressions donnant les fréquences en fonction du vecteur d'onde. Les figures 8 et 9 représentent les courbes de dispersion qu'ils ont calculées dans cette dernière approximation, pour le silicium.

Parallèlement à cette étude, Cochran (15) a décrit un modèle de champ de forces pour les cristaux de la structure du germanium (silicium, étain gris) identique mathématiquement à celui de l'approximation dipolaire ; mais il en donne une représentation physique :

Chaque atome est constitué d'un corps central, formé du noyau et des électrons internes, et d'une couronne formée par les électrons des couches externes, de masse négligeable ; Cochran décrit l'interaction entre la couronne électronique et le corps centré d'un même atome par une constante de force isotrope ; et il prend en compte les forces agissant à courte distance entre le corps centré et la couronne électronique d'un atome et les corps centrés et les couronnes électroniques de ses premiers voisins ; ces forces résultent de la répulsion due à la pénétration mutuelle des atomes et de l'attraction de Van Der Waals. D'autre part, lors des vibrations du réseau cristallin, les positions relatives des corps centrés des atomes et des couronnes électroniques varient, produisant des dipôles qui exercent les uns sur les autres des forces électrostatiques à une distance relativement grande par rapport à la distance des atomes contigus. De même que dans le cas de l'approximation dipolaire où les interactions entre un atome et ses premiers voisins sont décrites par six paramètres, de même ici Cochran utilise six paramètres pour calculer les fréquences des oscillations.

Les courbes de dispersion obtenues sont généralement en bon accor avec les résultats expérimentaux de Brockhouse ; cependant, on observe un écart d'environ 10 %, entre les résultats expériméntaux et les calculs de Cochran, pour les fréquences des oscillations longitudinales acoustiques se propageant suivant l'axe de symétrie ternaire. Mais si l'on prend en compte les forces agissant à courte distance entre un atome et ses deuxièmes voisins, comme l'ont fait Kucher et Tolpygo, on obtient un très bon accord avec l'expérience.

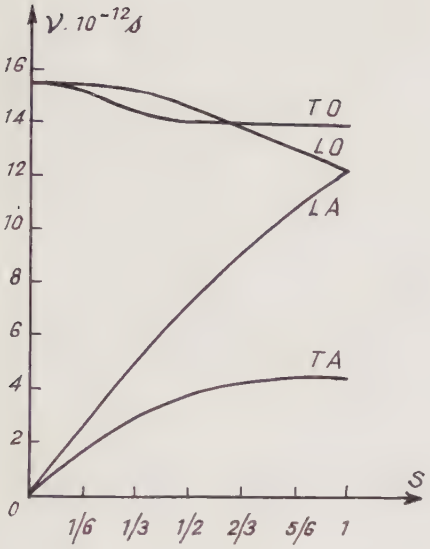


Fig. 8 : $\vec{S}$ parallèle à [100]

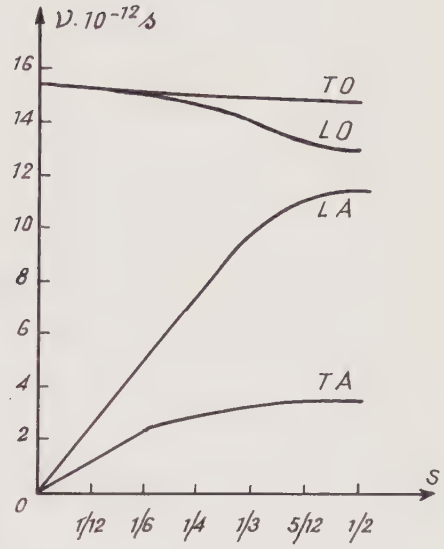


Fig. 9 : $\vec{S}$ parallèle à [111]

Courbes de dispersion des fréquences calculées par Kucher.

2ème Partie

LA DIFFUSION DES RAYONS X

Les principales causes de la diffusion des rayons X par un cristal sont l'agitation thermique des atomes et l'effet Compton.

La diffusion provoquée par l'agitation thermique est due à la réflexion des rayons X sur une ou plusieurs familles de plans d'ondes élastiques. Son étude permet d'obtenir des renseignements sur les oscillations atomiques. La diffusion par effet Compton correspond à l'interaction des photons X et des électrons du cristal.

A - LA DIFFUSION PAR LES ONDES ELASTIQUES

Il est commode de prendre en compte le vecteur de diffusion $\vec{X}$ ainsi défini : Soit λ la longueur d'onde de la radiation X utilisée ; nous tiendrons pour négligeable la différence de longueur d'onde entre les rayons X incidents et diffusés dans le cristal. Menons, dans le réseau polaire d'origine O un vecteur $\vec{1O}$ de module $\frac{1}{\lambda}$ parallèle à la direction d'un rayon incident et un vecteur $\vec{IX}$ de même module parallèle à la direction d'un rayon diffusé. $\widetilde{OIX}$ est l'angle de diffusion 2θ, $\vec{OX}$ le vecteur de diffusion et X le pôle de diffusion correspondant à une photométrie. (figure 10).

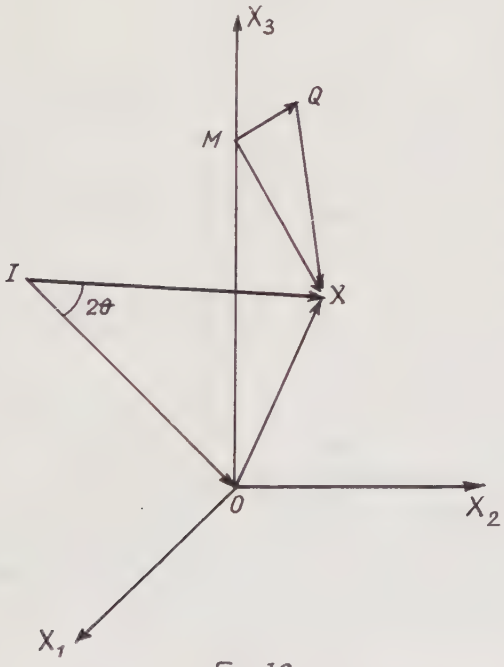


Fig. 10

On montre que si X se trouve dans une première zone de Brillouin centrée sur le noeud M du réseau polaire, il y a réflexion sélective des rayons X sur les plans d'ondes élastiques de vecteur d'onde fondamental $\vec{MX}$. Cette réflexion donne naissance à une diffusion, dite du premier ordre, à laquelle est associé un pouvoir diffusant P_1. Comparée à l'énergie des photons incidents, l'énergie des photons rejetés par cette diffusion du 1er ordre est accrue ou diminuée d'un quantum d'énergie thermique. De même, les rayons X peuvent se réfléchir sur des plans d'ondes élastiques produits par les interférences de deux oscillations harmoniques des atomes pilotées par les vecteurs d'onde fondamentaux $\vec{MQ}$ et $\vec{QX}$. A cette diffusion correspond un pouvoir diffusant P_2 ; les photons qu'elle rejette,

comparés aux photons incidents, ont perdu ou gagné en tout deux quanta d'énergie thermique (2).

Le pouvoir diffusant, seule grandeur mesurable, est la somme de ces pouvoirs diffusants partiels d'agitation thermique et du pouvoir diffusant par effet Compton. Le pouvoir diffusant du premier ordre fait intervenir douze oscillations harmoniques des atomes qui ont deux à deux la même fréquence et des vecteurs d'onde opposés ; de ce fait, il est entièrement déterminé par six oscillations harmoniques des atomes et on peut tirer de sa grandeur les fréquences et les vecteurs propres des oscillations harmoniques des atomes. C'est donc le pouvoir diffusant du premier ordre P_1 qu'il est nécessaire d'atteindre par la photométrie des rayons X diffusés.

1) Le pouvoir diffusant du premier ordre

Son expression, pour des oscillations rectilignes et dans le cas où la maille comprend 2 atomes identiques, est la suivante : (16)

$$P_1 = \frac{|\vec{X}|^2}{4Zm} \sum_{\alpha=1}^{6} \frac{E_\alpha}{\nu_\alpha^2} \left|\phi_\alpha\right|^2$$

$\vec{X}$: vecteur de diffusion

$2Z$: nombre d'électrons de la maille élémentaire

$2m$: masse de la maille élémentaire

$E\alpha$: énergie de l'oscillation de fréquence ν_α pilotée par le vecteur d'onde $\vec{MX}$; dans le silicium, un vecteur d'onde pilote 6 oscillations, 3 acoustiques, et 3 optiques

$|\phi_\alpha|$: $f\, H \cos(\vec{X}, \vec{a_\alpha}) \left|1 + e^{i2\pi \left[(M_1 + M_2 + M_3)/4 + \eta_\alpha \right]}\right|$

f : facture de structure atomique

H : facteur de Debye Waller

$\vec{a_\alpha}$: vecteur ayant la direction du vecteur élongation de l'oscillation de fréquence ν_α prise par les atomes

$M_1\ M_2\ M_3$: indices du noeud M du réseau réciproque centre de la première zone de Brillouin qui contient le pôle X.

η_α : phase de l'oscillation de l'atome de silicium indexé 2 de coordonnée (d/4, d/4, d/4) par rapport à celle de l'oscillation de l'atome silicium indexé 1 de coordonnées (0,0,0).

2) Le pouvoir diffusant du second ordre

Appelons $[X]$ la première zone de Brillouin centrée sur X.

Le réseau polaire est divisible en première zones de Brillouin M centrées sur les noeuds M de ce réseau, accolées les unes aux autres. Parmi toutes ces zones huit ont un volume commun avec $[X]$. Soient $[M_n]$ les zones correspondantes (n = 1,2,...8). Le pouvoir diffusant du second ordre d'un cristal dont la maille contient deux atomes identiques a pour expression (16) :

$$P_2 = \frac{|\vec{X}|^4}{16\ Zm^2} \sum_{n=1}^{8} Y(M_n, X)$$

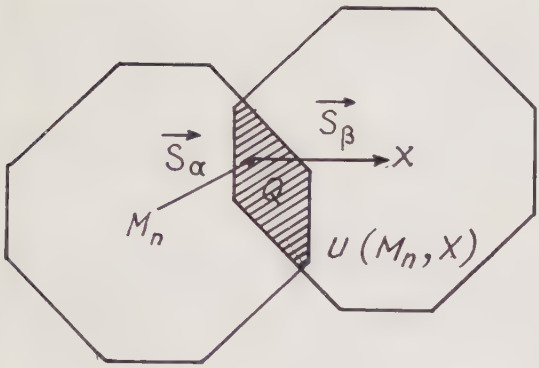


Fig. 11

$Y(M_n, X)$ est une fonction qui dépend de M_n et de X, et qui est ainsi définie : Soit $U(M_n, X)$ le volume commun à $[M_n]$ et $[X]$ (fig. 11), Q un point à l'intérieur de ce volume et dU (Q) un petit élément de volume entourant le point Q. La fonction $Y(M_n, X)$ s'exprime :

$$Y(M_n, X) = v \iiint_{U(M_n, X)} y(Q, M_n, X)\, dU(Q)$$

où v est le volume de la maille élémentaire du cristal, $y(Q, M_n, X)$ une fonction qui dépend non seulement de M_n et de X mais encore de Q : tout point Q définit, comme on l'a vu, deux vecteurs d'onde $\vec{S}_\alpha = \vec{MQ}$ et $\vec{S}_\beta = \vec{QX}$ qui pilotent chacun six oscillations, deux d'entre elles (une par vecteur d'onde) échangeant de l'énergie avec le rayonnement incident.

Soit ν_α ou ν_β la fréquence de l'une des ondes pilotées par $\vec{S}_\alpha$ (ou $\vec{S}_\beta$).

$$y(Q, M_n, X) = f^2 . H^2 . \sum_{\alpha=1}^{6} \sum_{\beta=1}^{6} \frac{E_\alpha}{\nu_\alpha^2} \frac{E_\beta}{\nu_\beta^2} \left| \cos(\vec{X}, \vec{a_\alpha}) \cos(\vec{X}, \vec{a_\beta}) \left(1 + e^{i 2\pi \left[(M_{n_1} + M_{n_2} + M_{n_3}) /4 + \eta_\alpha + \eta_\beta \right]}\right) \right|^2$$

Cette expression comprend 36 termes :

9 obtenus en combinant 2 oscillations α et β acoustiques, auxquels correspond un pouvoir diffusant $P_2(AA)$

9 obtenus en combinant 2 oscillations α et β optiques auxquels correspond un pouvoir diffusant $P_2(OO)$

18 obtenus en combinant une oscillation optique et une acoustique, auxquels correspond un pouvoir diffusant $P_2(AO)$.

Pour calculer rigoureusement ces pouvoirs diffusants du second ordre, il faut connaitre pour tous les vecteurs d'onde possibles les fréquences ν_α et les phases η_α des oscillations correspondantes. On peut donc les évaluer a priori à l'aide des renseignements obtenus par la matrice de Fourier. Même alors, le calcul de P_2 est inextricable, si l'on ne fait pas, en suivant Mériel (17) certaines hypothèses simplificatrices :

1) on assimilera les premières zones à des sphères de rayon R de même volume que les zones réelles (cuboctaèdre de volume $\frac{1}{v} = \frac{4}{d^3}$).

2) on supposera l'équipartition de l'énergie satisfaite pour les oscillations acoustiques. On posera donc pour de telles oscillations

$E = kT$ au lieu de $E = h\nu\left(\frac{1}{\exp\frac{h\nu}{kT}-1} + \frac{1}{2}\right)$, expression valable à 2 % près jusqu'à des fréquences de l'ordre de $3.10^{12}s^{-1}$.

3) on prendra la fréquence des ondes optiques constante, indépendante du vecteur d'onde et égale à la fréquence principale ν_o. L'énergie E_o associée à cette onde est alors constante.

4) on supposera que les phases des oscillations atomiques sont constantes, indépendantes du vecteur d'onde et égales à la valeur correspondant au vecteur d'onde nul pour chaque zone.

5) on admettra que les trois oscillations de même genre (acoustique ou optique) pilotées par le même vecteur d'onde sont trirectangulaires (ceci est rigoureux pour des vecteurs d'onde dirigés parallèlement à un élément de symétrie du cristal, et reste approximativement vrai pour des vecteurs d'onde de direction quelconque).

a) pouvoir diffusant $P_2(00)$

avec les hypothèses précédentes, on a

$$y(Q,M_n,X) = \left(\frac{E^o}{\nu_o^2}\right)^2 . f^2 . H^2 . \left| 1+e^{i2\pi\left[(M_{n_1}+M_{n_2}+M_{n_3})/4 + 2\eta_{op}\right]}\right|^2$$

On en déduit :

$$Y(M_n,X) = v . f^2 H^2 \left(\frac{E_o}{\nu_o^2}\right)^2 . \left| 1+e^{i2\pi\left[(M_{n_1}+M_{n_2}+M_{n_3})/4 + 2\eta_{op}\right]}\right|^2 . U(M_n,X)$$

Posant

$U(M_n,X) = \frac{1}{v} A(M_n,X)$ où $A(M_n,X)$ est un coefficient qui varie de 0 à 1 quand la distance M_nX varie de 2R à 0, il vient

$$P_2(00) = \frac{|\vec{X}|^4 F^2 H^2}{16 Zm^2}\left(\frac{Eo}{\nu_o^2}\right)^2 \sum_{n=1}^{8} \left| 1 + e^{i2\pi\left[(M_{n_1}+M_{n_2}+M_{n_3})/4 + 2\eta_{op}\right]}\right|^2 . A$$

avec $A(M_n,X) = \frac{(1-u)^2(2+u)}{2}$ et $u = \frac{M_nX}{2R}$

b) pouvoir diffusant $P_2(A\ O)$

Dans l'expression de $y(Q,M_n,X)$ il doit être entendu que si dans la première sommation l'indice α caractérise une onde optique, l'indice β doit caractériser une onde acoustique, et inversement,

Posant pour les oscillations acoustiques $\nu_\alpha = V_\alpha |\vec{S}_\alpha|$ V_α étant la vitesse de propagation de l'oscillation, $y(Q,M_n,X)$ se formule :

$$f^2 H_o^2 \frac{Eo}{\nu_o^2} \cdot kT \left[\frac{1}{S_\alpha^2} \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \frac{1}{V_\alpha^2} \cos^2(\vec{X},\vec{a_\alpha}) \cdot \left| 1+e^{i2\pi (M_{n_1} + M_{n_2} + M_{n_3})/4 + \eta_\alpha + \eta_\beta} \right| \right.$$

$$\left. \cdot \cos^2(\vec{X},\vec{a_\beta}) \right.$$

$$+ \frac{1}{S_\beta^2} \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \frac{1}{V_\beta^2} \cos^2(\vec{X},\vec{a_\alpha}) \cdot \cos^2(\vec{X},\vec{a_\beta}) \cdot 1+z^{i2\pi[} \cdot$$

$$\left. \left| 1+e^{i2\pi(M_{n_1} + M_{n_2} + M_{n_3})/4 + \eta_\alpha + \eta_\beta} \right|^2 \right]$$

Dans la première sommation double, c'est l'onde α qui est du genre acoustique, dans la deuxième l'onde β . Le calcul ne peut-être poursuivi si l'on ne prend pas pour V_α , qui dépend de trois facteurs-de $\vec{S}_\alpha$ en grandeur et en direction, ainsi que du type d'oscillation considéré (L ou T)- une valeur moyenne.

Pour tenir compte du fait que l'oscillation peut-être longitudinale ou transversale, on prendra pour V_α une première valeur moyenne définie par :

$$\left(\overline{\frac{1}{V_\alpha^2}} \right) = \frac{1}{3} \left| \frac{1}{V_{\alpha L}^2} + \frac{1}{V_{\alpha T_1}^2} + \frac{1}{V_{\alpha T_2}^2} \right|$$

qui ne dépend plus que de $\vec{S}_\alpha$ (en grandeur et en direction).

Envisageons tous les vecteurs $\vec{S}_\alpha$ de même direction. On peut supposer en première approximation que la dispersion des fréquences acoustiques en fonction de $\vec{S}_\alpha$ est sinusoïdale, ce qui impose pour une onde, disons longitudinale $\frac{1}{V_{\alpha L}^2} = \frac{1}{V_{o\alpha L}^2} \frac{x_\alpha^2}{\sin^2 x_\alpha}$ où $V_{o\alpha L}$ est la vitesse de propagation des ondes longitudinales pour $|\vec{S}_\alpha| = 0$, (soit la vitesse de propagation des ondes sonores longitudinales dans la direction considérée) et $x_\alpha = \frac{\pi}{2} \frac{S_\alpha}{S_1}$, $\vec{S}_1$ étant le vecteur d'onde fondamental de plus grand module suivant la direction considérée. La valeur moyenne de cette expression, quand $\vec{S}_\alpha$ va de O à $\vec{S}_1$ est :

$$\frac{1}{V_{\alpha L}^2} = \frac{1}{V_{o\alpha L}^2} \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{x^2}{\sin^2 x} dx = \frac{2 \operatorname{Log} 2}{V_{o\alpha L}^2} = \frac{1,386}{V_{o\alpha L}^2}$$ et l'on prendra

une seconde valeur moyenne

$$\left(\frac{1}{V_\alpha^2}\right) = \frac{1,386}{3}\left(\frac{1}{V_{o\alpha L}^2} + \frac{1}{V_{o\alpha T_1}^2} + \frac{1}{V_{o\alpha T_2}^2}\right)$$ qui ne dépend plus de $\vec{S}_\alpha$ que par la direction.

Dans toutes nos mesures, le pôle de diffusion se déplace sur un axe de symétrie du réseau polaire. Les contributions les plus fortes au pouvoir diffusant du second ordre, proviennent des ondes dont les deux vecteurs d'onde ont leur extrêmité commune dans le volume commun à la zone $[X]$ et aux deux zones $[M_n]$ dont les centres M_n sont alignés avec X sur cet axe de symétrie. Les vecteurs $\vec{S}_\alpha$ et $\vec{S}_\beta$ correspondants étant peu inclinés sur l'axe, on confondra les vitesses $V_{o\alpha L}$, $V_{o\alpha T_1}$, $V_{o\alpha T_2}$ avec les valeurs V_L, V_{T_1}, V_{T_2}, qu'elles ont dans la direction de l'axe de symétrie considéré.

Posant $\frac{1}{V^2} = \frac{1,386}{3}\left(\frac{1}{V_L^2} + \frac{1}{V_{T_1}^2} + \frac{1}{V_{T_2}^2}\right)$, on a

$$y(Q,M_n,X) = f^2 H^2 \frac{E_o}{\nu_o^2} \cdot \frac{kT}{V^2} \cdot \left| 1+e^{i2\pi\left[(M_{n_1}+M_{n_2}+M_{n_3})/4+\eta_{ac}+\eta_{op}\right]}\right|^2 \left(\frac{1}{S_\alpha^2}+\frac{1}{S_\beta^2}\right)$$

$$Y(M_n,X) = f^2 H^2 \frac{E_o}{\nu_o^2} \cdot \frac{vkT}{V^2} \cdot \left| 1+e^{i2\pi\left[(M_{n_1}+M_{n_2}+M_{n_3})/4+\eta_{ac}+\eta_{op}\right]}\right|^2 \cdot \iiint_{U(M_n,X)} \left(\frac{1}{S_\alpha^2}+\frac{1}{S_\beta^2}\right) dU(Q)$$

Posant $\iiint_{U(M_n,X)} \frac{1}{S_\alpha^2}\, dU(Q) = 4\pi RB(M_n,X)$, où $B(M_n,X)$ est un coefficie numérique qui varie de 0 à 1 quand la distance M_nX varie de 2R à 0, il vien

$$P_2(AO) = \frac{|\vec{X}|^4 f^2 H^2}{16\, Zm^2} \cdot \frac{E_o}{\nu_o^2} \cdot \frac{8\pi RvkT}{V^2} \cdot \sum_{n=1}^{8} \left| 1+e^{i2\pi(M_{n_1}+M_{n_2}+M_{n_3})/4+\eta_{ac}+\eta_{op}}\right| \cdot B(M_n,X)$$

avec $B(M_n,X) = \frac{3(1-u')}{8} + \frac{u'(u'+2)\mathrm{Log}\, u'}{4(u'+1)}$ et $u' = \frac{M_nX}{R} - 1$.

c) Pouvoir diffusant $P_2(AA)$.

Avec les mêmes hypothèses, on a :

$$y(Q,M_n,X) = f^2 H^2 (kT)^2 \frac{1}{S2_\alpha\ S2_\beta} \cdot \sum_{\alpha=1}^{3} \sum_{\beta=1}^{3} \frac{1}{V_\alpha^2}\ \frac{1}{V_\beta^2} \cos^2(\vec{X},\vec{a_\alpha}) \cos^2(\vec{X},\vec{a_\beta}) \cdot$$

$$\cdot \left| 1+e^{i2\pi\left[(M_{n_1}+M_{n_2}+M_{n_3})/4 + \eta\alpha + \eta\beta\right]} \right|^2$$

où α et β caractérisent chacun une onde acoustique. Etant données les hypothèses précédentes, on devra faire la moyenne de produits de la forme

$$\frac{x_\alpha^2}{\sin^2 x_\alpha}\ \frac{x_\beta^2}{\sin^2 x_\beta}$$

on admettra que chaque terme varie indépendamment. Avec cette nouvelle hypothèse, on remplacera

$$\frac{1}{V_\alpha^2}\ \frac{1}{V_\beta^2} \quad \text{par} \quad \frac{1}{V^4} \text{ ; il vient alors}$$

$$Y(M_n,X) = f^2 H^2 \frac{(kT)^2}{V^4} v. \left| 1+e^{i2\pi\left[(M_{n_1}+M_{n_2}+M_{n_3})/4 + 2\eta ac\right]} \right|^2 \cdot$$

$$\iint \frac{1}{S_\alpha^2\ S_\beta^2}\, dU(Q)\ \ U(M_n,X)$$

Le calcul de cette intégrale a été effectué graphiquement (17) en la posant, égale, par homogénéité, à $\frac{\pi}{R} C(M_n,X)$, d'où

$$P_2(AA) = \frac{|\vec{X}|^4\ f^2 H^2}{16\ Zm^2} \cdot \frac{(kT)^2\ \pi v}{V^4 R} \cdot \sum_{n=1}^{8} \left| 1+2\pi\left[(M_{n_1}+M_{n_2}+M_{n_3})/4 + 2\eta ac\right] \right|^2 \cdot$$

$$\cdot\ C(M_n,X)$$

Les courbes suivantes donnent la variation du pouvoir diffusant du deuxième ordre P_2 en fonction du vecteur de diffusion aux températures de 293 et 580° K. Les vecteurs d'onde $\vec{S}$ sont dirigés respectivement suivant les axes de symétrie quaternaire et ternaire (Fig. 12-13-14-15). Les valeurs numériques de ces pouvoirs diffusants P_2 seront donnés plus loin en même temps que les valeurs de P_1.

3) Pouvoir diffusant du 3ème ordre

Nous l'avons évalué en tenant compte des approximations indiquées par Mériel (17). Il est toujours négligeable aux températures de 293 et 580° K, pour les vecteurs de diffusion que nous avons utilisés dans nos mesures.

Pouvoir diffusant du deuxième ordre

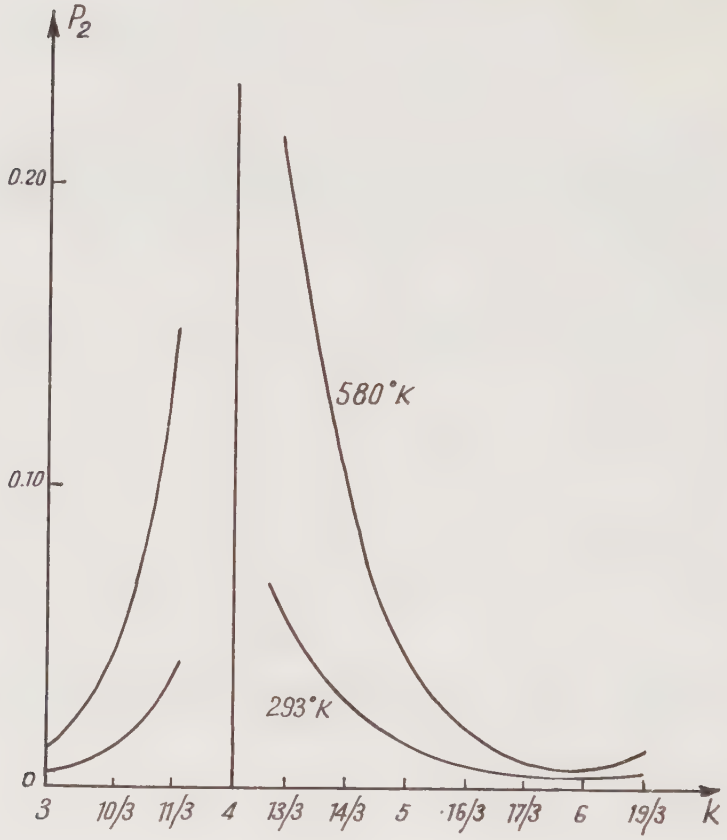


Fig. 12 - $\vec{S}$ 77 à [100] Ondes longitudinales. $\vec{X}$ (k, 0, 0,)

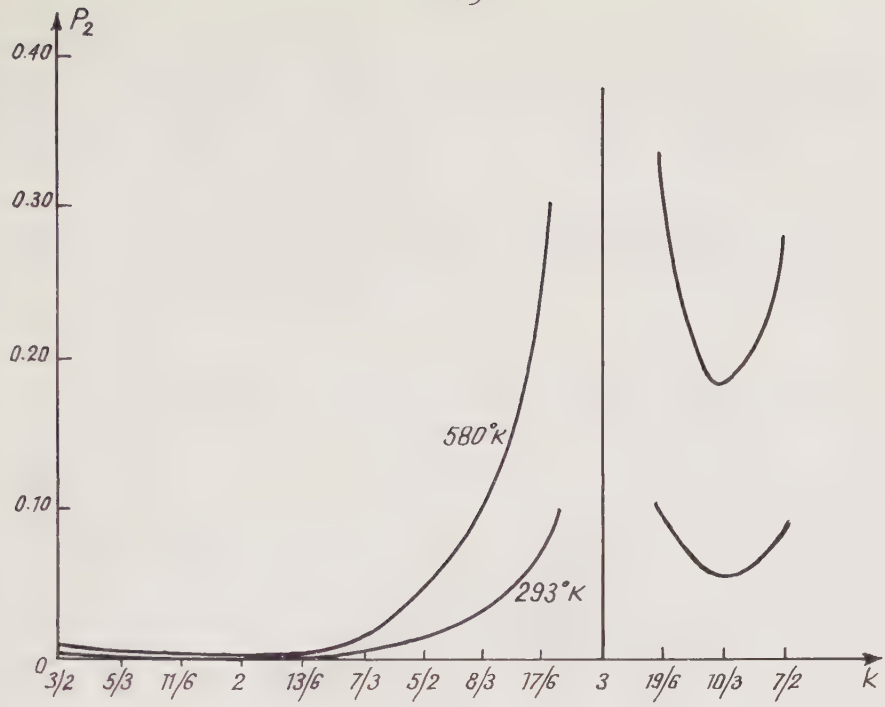


Fig. 13 - $\vec{S}$ // à [111]. Ondes longitudinales. $\vec{X}$ (k, k, k).

Pouvoir diffusant du deuxième ordre.

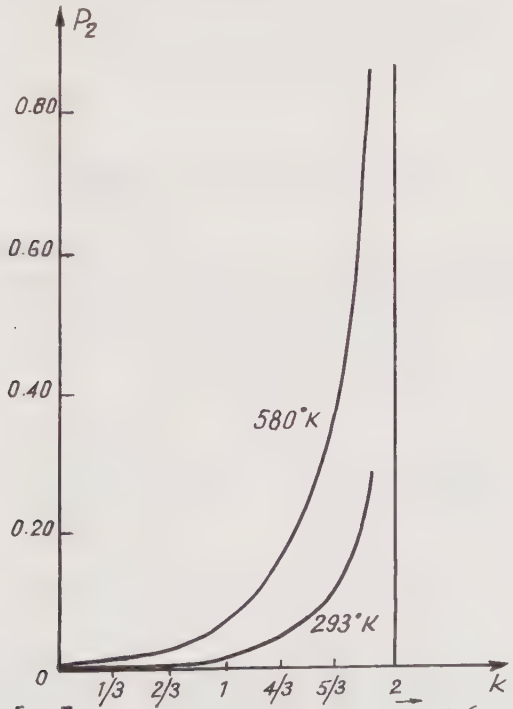


Fig. 14 - $\vec{S}$ // [100]. Ondes transversales. $\vec{X}$ (6, k, 0).

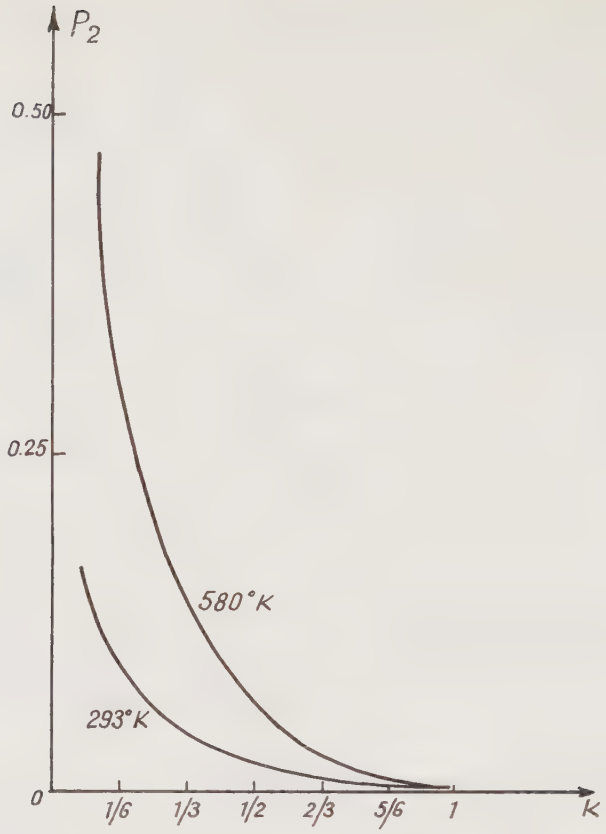


Fig. 15 - $\vec{S}$ // [111]. Ondes transversales. $\vec{X}$ (3 + k, 3 + k, 3 - k).

B - LA DIFFUSION PAR EFFET COMPTON

L'effet Compton consiste en un transfert d'énergie d'un photon à un électron (dit de recul) qui est ejecté hors d'un atome ; son intensité est mesurée par celle de la diffusion des rayons X qu'il produit. D'autre part, elle se calcule à partir de la formule de Waller et Hartree ; pour un atome de nombre atomique Z, elle est donnée par

$$I = Z - \sum_{ij} \left| fij \right|^2 ,$$ où nous avons négligé le facteur de Breit-Dirac $\left(\frac{\nu}{\nu'}\right)^3$ dans lequel ν et ν' sont les fréquences des rayons X avant et après la diffusion ; ψ étant les fonctions d'onde pour un électron, on a :

$$fij = \int \psi_i^* (\vec{r}) \exp.(i2\pi \vec{X}.\vec{r}) \psi_j (\vec{r}) \, dv.$$

La plupart des calculs de la diffusion par effet Compton négligen les termes d'échanges ($i \neq j$) dans l'expression de l'intensité diffusée ; qu'ainsi ils surestiment. Freeman a repris ces calculs, (18) en tenant

compte des termes d'échange, ce qui modifie de façon notable les résultats; les intensités diffusées qu'il obtient sont en assez bon accord avec les résultats expérimentaux de Laval (19), Curien et Deroche (20), Walker (21), Cribier (22), Boccara (5).

A partir de l'expression de l'intensité diffusée, on peut définir un pouvoir diffusant par effet Compton, pour le silicium :

$$Pc \simeq 1 - \frac{\sum_{ij} |f\,i\,j|^2}{14}$$

Les résultats des calculs de Freeman sont les suivants :

($\vec{X}$ est le vecteur de diffusion : $|\vec{X}| = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$.

X. 10^{-8}cm	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0	1,2	1,4	1,8	2,2
Pc	0	0,176	0,326	0,411	0,487	0,561	0,628	0,686	0,773	0,828

3ème Partie

DISPOSITIF EXPERIMENTAL - PRINCIPE DE L'ANALYSE DES RESULTATS EXPERIMENTAUX

A - DISPOSITIF EXPERIMENTAL

Un faisceau monochromatique de rayons X tombe sur un cristal centré sur un goniomètre.

Les mesures consistent à comparer l'intensité diffusée par le cristal dans un angle solide autour d'une direction déterminée à l'intensité du faisceau incident.

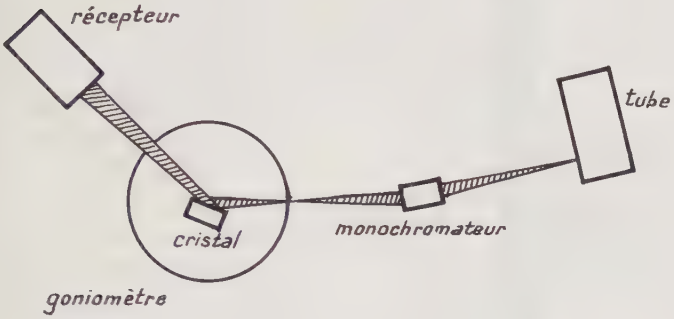


Fig. 16

Le spectrophotomètre (fig. 16) est du même type que ceux utilisés par Laval (1) et ses élèves. Le tube à rayons X est un tybe scellé à anticathode de Molybdène. Un monochromateur à lame de quartz courbée réfléchit sélectivement le doublet $\lambda K\alpha_1$, $\lambda K\alpha_2$ émis par le Molybdène, de longueur d d'onde moyenne 0,710 A° ; mais il réfléchit aussi sélectivement les harmoniques de ce rayonnement primaire ce qui impose à la tension excitatrice du tybe d'être inférieure à celle qui fait apparaître l'harmonique $\lambda/2$; ainsi, nous avons fait fonctionner le tube à rayons X sous 30 kilovolts, l'harmonique 2 n'apparaissant qu'à 34 kilovolts.

Le cristal peut-être placé à l'intérieur d'un cryostat ou d'un four reposant sur le plateau d'un goniomètre. Le cryostat est construit pour maintenir le cristal jusqu'à la température d'ébullition de l'hélium liquide.

Le four mis en service a les caractéristiques suivantes : le cristal est maintenu en contact très étroit avec un bloc de cuivre porté à la température désirée ; un thermocouple, touchant le porte cristal, permet de la vérifier à tout instant. Le cristal est entouré de trois écrans thermiques ; sur l'écran extérieur est enroulé un serpentin de cuivre où circule de l'eau de manière que l'enceinte extérieure, en plexiglass, soit à une température voisine de la température ambiante. L'ensemble de l'enceinte est maintenu sous vide. Les fenêtres percées dans la cloche de plexiglass pour permettre le passage des rayons X sont en terphane (polyetherophtalate de glycol), de 10 microns d'épaisseur (fig. 17).

Au cours des mesures effectuées sur le cristal à la température ambiante, on utilise également une enceinte de plexiglass recouvrant le porte-cristal, dans laquelle on fait le vide de façon à éliminer la diffusion

des rayons X par l'air. Sur son parcours, de part et d'autre de la cloche de plexiglass le faisceau de rayons X est canalisé par des écrans en plomb.

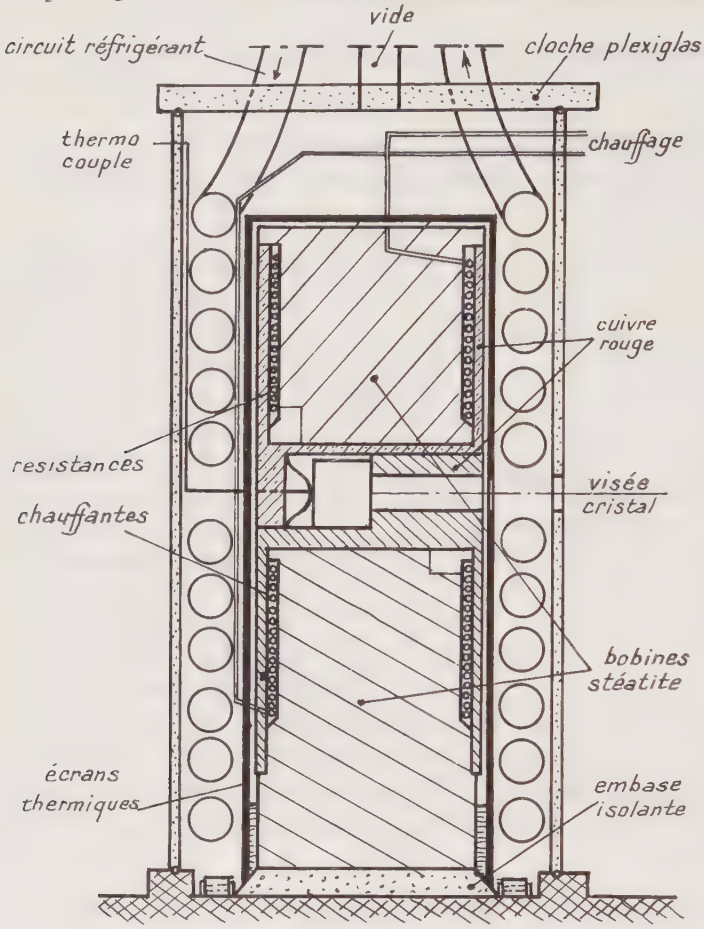


Fig. 17

Nous avons utilisé comme récepteurs un compteur de Geiger-Müller (type Anton 202 à fenêtre de mica et rempli de krypton) et une sonde à scintillation. Le cristal scintillateur de la sonde est un cristal d'iodure de sodium activé au thallium et les fenêtres sont en beryllium. Le bruit de fond du compteur à scintillation est plus faible que celui du compteur Geiger, ce qui améliore d'autant plus la précision des mesures que les intensités diffusées sont plus faibles.

Pour mesurer le flux incident, on utilise un absorbant qui réduit l'intensité du faisceau ; en effet, ni le compteur de Geiger ni la sonde à scintillation ne permettent de comparer les intensités diffusées par le cristal à l'intensité du faisceau incident qui est environ 10^6 fois plus forte. L'absorbant, constitué par une plaque d'Aluminium de 8,03 mm d'épaisseur, a été étalonné à l'aide d'une chambre d'ionisation associée à un électromètre de Lindeman.

L'intensité du faisceau de rayons X n'est pas constante dans le temps, ses fluctuations sont en moyenne de 4 %, malgré la présence dans le circuit d'alimentation du tube d'un stabilisateur de tension ; aussi mesure-t-on l'intensité du faisceau incident avant et après chaque mesure de l'intensité diffusée par le cristal.

Le rayonnement de fluorescence émis par le silicium est de grande longueur d'onde et il est absorbé par quelques centimètres d'air.

Les monocristaux de silicium utilisés ont été taillés perpendiculairement aux axes de symétrie ternaire et quaternaire. Les faces ainsi

taillées ont été polies au papier-émeri puis à l'alumine ; nous avons ensuite éliminé la couche écrouie par un polissage chimique au CP_4 (mélange d'acide fluorhydrique et d'acide nitrique).

B - POUVOIR DIFFUSANT

1) Son expression

Du rapport $\frac{i}{I}$ de l'intensité diffusée par le cristal dans un angle solide $\Delta\Omega$ autour d'une direction donnée à l'intensité du faisceau incident, on déduit le pouvoir diffusant du cristal qui est le rapport entre l'énergie diffusée par un électron du cristal et celle diffusée par un électron libre dans le même angle solide autour de la direction de diffusion considérée. Son expression est :

$$P = \frac{i}{I} \frac{\mu_e}{\varpi} \left(1+\frac{\sin a}{\sin b}\right) \frac{1}{\Delta\Omega}$$

$\frac{\mu_e}{\varpi}$ est le coefficient d'absorption du cristal rapporté à un électron.

ϖ est le pouvoir diffusant d'un électron libre dans les conditions de la photométrie. (J.J. Thomson)

a,b sont les angles des rayons moyens incident et diffusé avec la face cristalline.

$\Delta\Omega$ est l'angle solide dans lequel se propagent les rayons reçus par la pupille rectangulaire du compteur ; cette pupille a les dimensions suivantes :
hauteur h = 10,74 mm. largeur l = 1,86 mm. La valeur de l'angle solide correspondant est $\Delta\Omega = 1,39 .10^{-3}$ radian.

2) Divergence des faisceaux

Le pouvoir diffusant ainsi mesuré est un pouvoir diffusant moyen car les faisceaux incidents et diffusés ont une section non nulle et ne sont pas formés de rayons parallèles. Ce pouvoir diffusant est donc une moyenne pondérée des pouvoirs diffusants correspondant à tous les couples possibles de rayons incidents et diffusés.

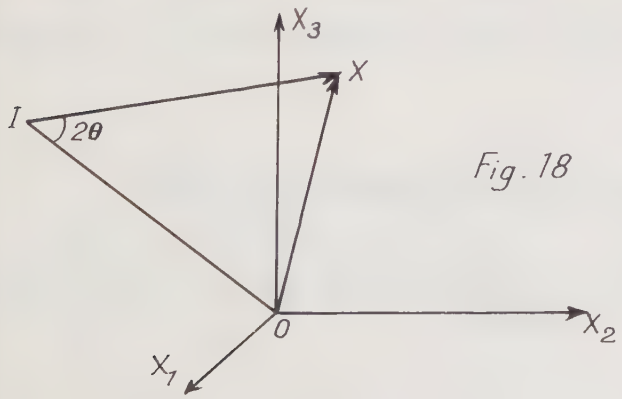


Fig. 18

Soient $\widehat{OIX}$ l'angle de diffusion 2θ ; $\overrightarrow{OX}$ le vecteur de diffusion, et X le pôle de diffusion correspondant au couple de rayons incident et diffusé considéré (fig. 18).

A cause de la divergence des faisceaux incident et diffusé, chaque mesure

est relative à une valeur moyenne des pouvoirs diffusants correspondant à tous les pôles de diffusion compris dans un petit volume (domaine de divergence) entourant le pôle moyen de diffusion X_o.

Pour chaque photométrie, nous représenterons la section du domaine de divergence correspondant par le plan de diffusion moyen OI_oX_o. Cette section a sensiblement la forme d'un parallélogramme.

Différentes corrections ont été proposées pour déduire du pouvoir diffusant moyen le pouvoir diffusant vrai correspondant au pôle moyen X_o (23) (24).

Nous avons effectué plusieurs mesures de diffusion en des points situés au voisinage des réflexions de Bragg, pour différentes valeurs de l'angle solide $\Delta\Omega$. L'étude de l'influence des dimensions des fentes délimitant le faisceau sur la valeur du rapport $\frac{i}{I}$ de l'intensité diffusée dans une direction donnée à l'intensité du faisceau incident fournit des renseignements sur la correction de divergence à effectuer ; les résultats que nous avons trouvés de cette manière sont en assez bon accord avec ceux que donne la méthode proposée par Curien (24) qui ramène le problème à celui des moyennes mobiles. Dans l'étude des ondes longitudinales les parallélogrammes qui représentent les sections définies plus haut des domaines de divergence sont couchés sur la direction de plus grande variation du pouvoir diffusant, et la correction de divergence à effectuer est notable. Au contraire, dans l'étude des ondes transversales, les sections correspondantes ont leur plus grande dimension perpendiculaire à la direction de plus forte variation du pouvoir diffusant, et la correction de divergence est négligeable devant les erreurs expérimentales.

3) Précision sur le pouvoir diffusant mesuré.

En répétant un grand nombre de fois la mesure en un point donné, nous avons réduit l'erreur sur le rapport $\frac{i}{I}$ à 2 % environ.

Le coefficient d'absorption du silicium a été mesuré par Roof (25) à 1 % près ; l'angle solide dans lequel on mesure la diffusion est déterminé avec une précision inférieure à 1 %. L'erreur sur le terme $1 + \frac{\sin a}{\sin b}$ est négligeable.

Ainsi, on peut estimer l'erreur probable sur le pouvoir diffusant mesuré à 4 %.

C - RENSEIGNEMENTS QUE PERMET D'OBTENIR LA DIFFUSION

Afin de déduire de notre étude la valeur de l'effet Compton et les fréquences des oscillations thermiques, il est nécessaire de porter le cristal à des températures différentes.

En abaissant la température du cristal, on réduit la diffusion résultant de l'agitation thermique ; du pouvoir diffusant **total** mesuré à basse température, nous retranchons le pouvoir diffusant d'ordre 1 calculé (ceux d'ordre supérieur sont négligeables) pour obtenir le pouvoir diffusant par effet Compton.

Au contraire, pour déterminer avec précision les fréquences des oscillations thermiques, il faut que le pouvoir diffusant d'ordre 1 soit suffisamment important ; aussi avons nous, à cette fin, effectué des mesures aux températures de 293 à 580° K ; nous retranchons alors du pouvoir diffusant total mesuré le pouvoir diffusant par effet Compton et le pouvoir diffusant d'ordre 2 calculé. En effet, c'est seulement à partir du pouvoir diffusant du premier ordre P_1 qu'on peut remonter sans indétermination à la matrice de Fourier puis à la matrice dynamique de Born. Ce pouvoir diffusant est déterminé entièrement par les six oscillations atomiques qui sont pilotées par le vecteur d'onde $\vec{X}$ et qui admettent pour vecteur d'onde fondamental $\vec{S} = \vec{MX}$, M étant le noeud du réseau réciproque dont la première zone contient le pôle X. Mais si ce pôle est en position générale, pour déterminer les fréquences des oscillations atomiques il est nécessaire de mesurer des pouvoirs diffusants en très grand nombre. Cependant, le problème se simplifie dans les cas suivants :

1) Etude des ondes longitudinales

Si le pôle de diffusion se trouve sur l'un des axes de symétrie du réseau réciproque, la diffusion du premier ordre est due seulement aux 2 oscillations longitudinales, l'une optique, l'autre acoustique pilotées par le vecteur d'onde fondamental $\vec{MX}$, M étant le noeud situé sur l'axe où le pôle de diffusion X se déplace et dont la zone contient X. (fig. 19.

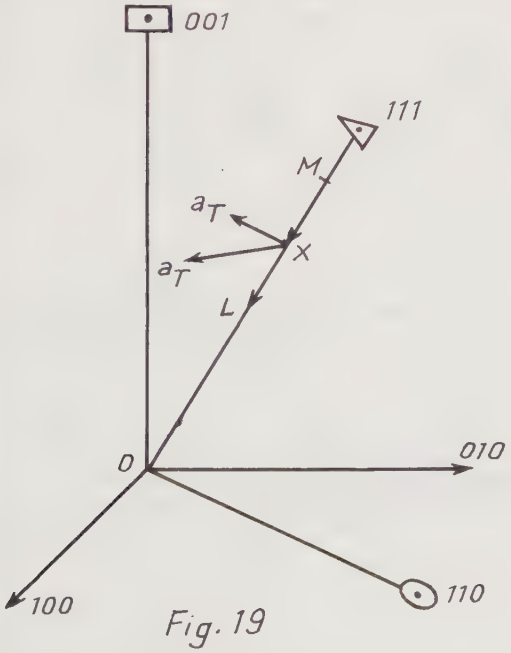


Fig. 19

Les oscillations transversales rectilignes qui sont orthogonales à $\vec{OX}$ ne contribuent pas à la diffusion du premier ordre, car leur vecteur élongation est normal au vecteur de diffusion. ($\cos(\vec{X}, \vec{a_T}) = 0$). le pouvoir diffusant du premier ordre s'exprime alors, pour le silicium :

$$P_1 = \frac{X^2 f^2 H^2}{4Zm}\left[4\,\frac{E_{AL}}{\nu^2_{AL}}\cos\frac{2\varphi_L}{2} + 4\,\frac{E_{OL}}{\nu^2_{OL}}\sin\frac{2\varphi_L}{2}\right].$$

AL désigne les oscillations acoustiques longitudinales

OL désigne les oscillations optiques longitudinales,

et $\varphi_L = 2\pi\left[(M_1 + M_2 + M_3)/4 + \eta_L\right]$ η_L étant la phase de l'oscillation longitudinale accomplie par l'atome en position 1/4, 1/4, 1/4, par rapport à celle de l'oscillation longitudinale faite par l'atome origine.

2) Etude des ondes transversales

Il est impossible de trouver une position du vecteur de diffusio telle que les contributions des ondes longitudinales s'annulent. Mais on peut s'arranger pour que cette contribution soit faible et n'intervienne que comme un terme correctif. On peut alors la calculer soit à partir des résultats déjà connus pour les ondes longitudinales, soit à partir de la matrice de Fourier que nous avons déterminée.

a) Ondes transversales ayant leur vecteur d'onde parallèle à un axe de symétrie quaternaire.

Pour les étudier, on déplace le pôle de diffusion X à partir d'u noeud M de l'axe quaternaire (par exemple le noeud 0,0,2p de l'axe [0 0 1 sur un axe quaternaire joignant M(0,0,2p) à M'(0,2,2p) ou M"(0,$\bar{2}$,2p). (fig. 20).

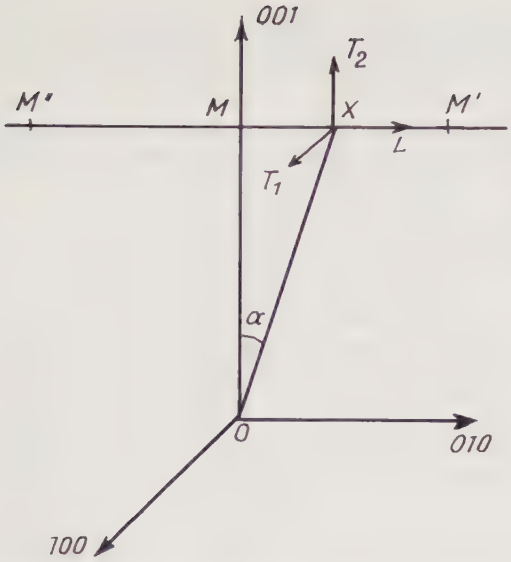
Les oscillations transversales étant dégénérées, on peut choisir l'une d'elles T_2 dans le plan MOX, l'autre T_1 perpendiculaire au plan MOX cette dernière n'apporte nulle contribution au pouvoir diffusant du premier ordre. L'angle $\widetilde{XOM}$ étant noté α, on a

$$P_1 = \frac{X^2 f^2 H^2}{4Zm}\left[\left(4\,\frac{E_{AT}}{\nu_{AT}^2}\cos^2\frac{\varphi_T}{2} + 4\,\frac{E_{OT}}{\nu_{OT}^2}\sin^2\frac{\varphi_T}{2}\right)\cos^2\alpha + \left(4\frac{E_{AL}}{\nu_{AL}^2}\cdot\cos^2\frac{\varphi_L}{2} + 4\,\frac{E_{OL}}{\nu_{OL}^2}\sin^2\frac{\varphi_L}{2}\right)\sin^2\alpha\right]$$

où $\varphi_T = 2\pi\left[(M_1 + M_2 + M_3)/4 + \eta_T\right]$

η_T étant la phase de l'oscillation transversale accomplie par l'atome en pposition 1/4,1/4,1/4 par rapport à celle de l'oscillation transversale faite par l'atome situé à l'origine.

La contribution des oscillations longitudinales reste toujours faible, si le pôle de diffusion X ne s'éloigne pas trop du noeud M($\sin^2\alpha \neq 0$) et n'intervient que comme terme correctif. On peut isoler

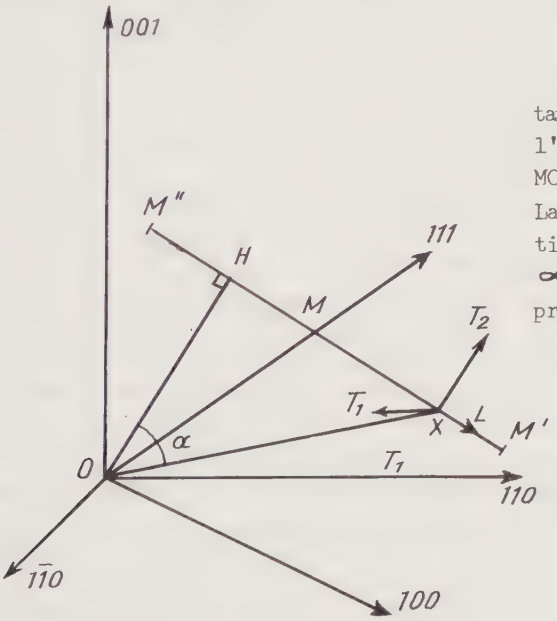


du pouvoir diffusant du 1er ordre P_1 le terme prépondérant qui dépend des deux oscillations transversales acoustique et optique.

Fig. 20

b) Ondes transversales ayant leur vecteur d'onde parallèle à un axe de symétrie ternaire.

Dans le plan contenant les trois axes [001], [110], [111], on déplace le pôle de diffusion X sur l'axe ternaire joignant le noeud M(p,p,p) au noeud M' (p+1,p+1,p−1) ou au noeud M" (p−1,p−1,p+1). (Fig. 21.



Les oscillations transversales étant dégénérées, on peut choisir l'une d'elles T_1 normale au plan MOX, l'autre T_2 dans le plan MOX. La première donne une contribution nulle. L'angle $\widetilde{HOX}$ étant noté α, le pouvoir diffusant reste exprimé par la formule précédente.

Fig. 21

3) Les valeurs numériques des pouvoirs diffusants des premier et deuxième ordres calculés aux températures de 293° K et 580° K sont données dans les tableaux suivants.

Les facteurs de Debye-Waller ont été calculés d'après les données des "Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen". Les facteurs de structure ont été calculés par Freeman (26).

$\vec{X}\left(|\vec{X}| = \frac{2\sin\theta}{\lambda}\right)$ est le vecteur de diffusion, ses composantes cartésiennes sont notées k_1, k_2, k_3.

- vecteur d'onde $\vec{S}$ parallèle à l'axe [100].

α) diffusion par les oscillations longitudinales. $\vec{X}(k, 0, 0)$

k	3	10/3	11/3	4	13/3	14/3	5	16/3	17/3	6	
P_1	0,130	0,220	0,693	-	0,799	0,291	0,197	0,160	0,139	0,132	T=293° K
P_2	0,003	0,011	0,033	-	0,054	0,027	0,015	0,008	0,005	0,004	
P_1	0,211	0,378	1,279	-	1,441	0,477	0,361	0,258	0,208	0,182	T=580° K
P_2	0,012	0,039	0,130	-	0,198	0,095	0,064	0,031	0,014	0,007	

β) diffusion par les oscillations transversales. $\vec{X}(6, k, 0)$

k	0	1/3	2/3	1	4/3	5/3	2	
P_1	0,132	0,194	0,223	0,305	0,533	1,720	-	T=293° K
P_2	0,004	0,006	0,010	0,023	0,050	0,135	-	
P_1	0,182	0,271	0,331	0,443	0,835	2,471	-	T=580° K
P_2	0,007	0,012	0,028	0,068	0,160	0,508	-	

- vecteur d'onde $\vec{S}$ parallèle à l'axe [111].

α) diffusion par les oscillations longitudinales. $\vec{X}(k, k, k)$

k	5/3	11/6	2	13/6	7/3	5/2	8/3	17/6	3	
P_1	0,118	0,117	0,098	0,136	0,161	0,212	0,297	0,691	-	T=293° K
P_2	0,001	0,001	0,001	0,001	0,004	0,013	0,029	0,073	-	
P_1	0,192	0,192	0,146	0,221	0,254	0,337	0,490	1,403	-	T=580° K
P_2	0,005	0,003	0,002	0,004	0,012	0,045	0,097	0,249	-	

β) diffusion par les oscillations transversales. $\vec{X}$ (3+k, 3+k, 3-k).

k	0	1/6	1/3	1/2	2/3	5/6	1	
P_1	-	0,970	0,271	0,188	0,167	0,154	0,132	T°=293° K
P_2	-	0,090	0,045	0,025	0,010	0,005	0,004	
P_1	-	1,674	0,425	0,277	0,240	0,216	0,176	T=580° K
P_2	-	0,315	0,140	0,072	0,032	0,012	0,007	

4ème Partie

RESULTATS EXPERIMENTAUX

A - MESURE DE L'EFFET COMPTON

Afin de déterminer l'intensité de la diffusion par effet Compton, nous avons abaissé la température du cristal de façon à réduire la diffusion résultant de l'agitation thermique ; comme les cristaux de silicium fondent à température élevée (1693°K), leur pouvoir diffusant total d'agitation thermique se réduit, à 77°K (température d'ébullition de l'azote liquide) ou pouvoir diffusant d'ordre 1, qui est sensiblement le même qu'au zéro absolu, sauf si le pôle de diffusion est près d'un noeud du réseau polaire.

Nous avons mesuré l'intensité totale des rayons X diffusés se rapportant à des vecteurs de diffusion $\vec{X}$ dirigés suivant un axe de symétrie quaternaire ; et nous avons calculé le pouvoir diffusant du premier ordre des oscillations longitudinales se propageant suivant cet axe de symétrie. Il estnenviron 4 fois plus faible que le pouvoir diffusant mesuré.

Le pouvoir diffusant total étant défini à 4 % près et l'erreur sur P_1 étant faible, le pouvoir diffusant par effet Compton P_c est déterminé avec une précision de l'ordre de 6 %.

Les résultats sont rassemblés dans le tableau ci-dessous ; pour chaque valeur du vecteur de diffusion $\vec{X}$, nous avons indiqué les coordonnées du pôle de diffusion X correspondant dans le réseau réciproque $\vec{X}$ (k,0,0)

k	X = 10^{-8}cm	Pmes.	P_1calculé	$P_c$mesuré
1	0,184	0,186	0,020	0,166
3	0,552	0,502	0,099	0,403
14/3	0,859	0,701	0,191	0,510
5	0,921	0,672	0,152	0,520
11/2	1,012	0,691	0,130	0,561
13/2	1,197	0,769	0,130	0,639
7	1,288	0,802	0,155	0,647
23/3	1,350	0,875	0,198	0,677

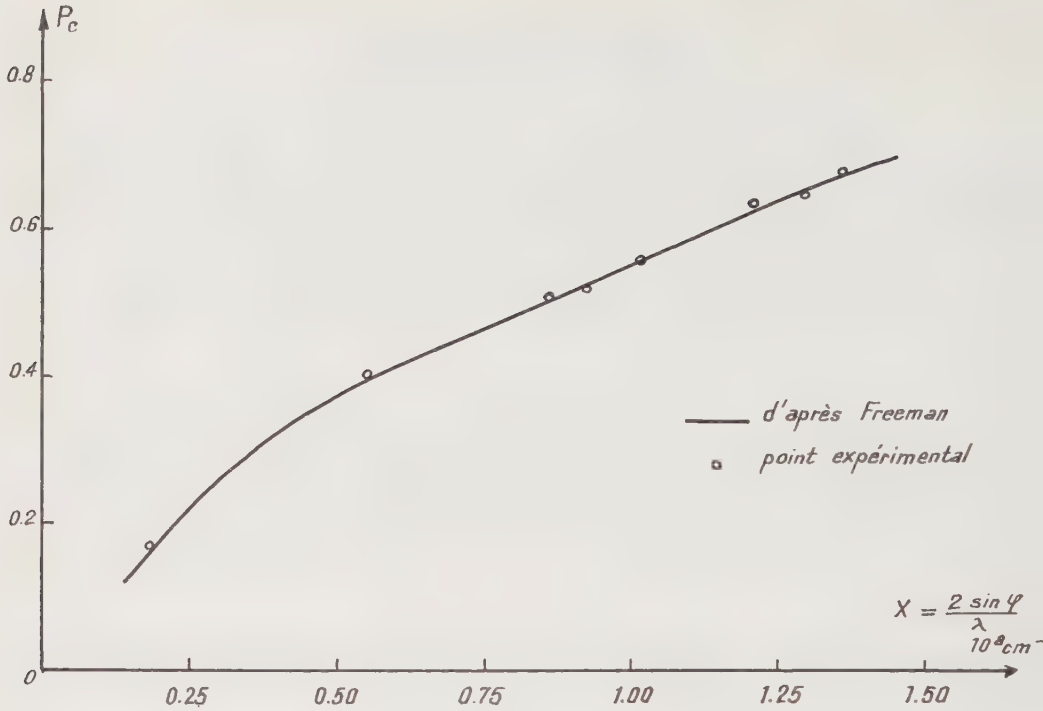


Fig. 22
(Pouvoir diffusant dû à l'effet Compton dans le silicium).

Sur la figure ci-dessus, la courbe représente les pouvoirs diffusants par effet Compton en fonction de $2\sin\Theta/\lambda$ obtenus d'après les calculs de Freeman ; j'ai porté sur la même figure les résultats de mes expériences ; on voit que les pouvoirs diffusants calculés par Freeman s'accordent sensiblement avec mes données expérimentales.

B - FREQUENCES DES OSCILLATIONS THERMIQUES DANS LE SILICIUM à 293 et 580°K

1) Hypothèses nécessaires à l'interprétation.

Nous avons vu que lorsque le vecteur d'onde $\vec{S}$ des oscillations est dirigé suivant un axe de symétrie du cristal, et c'est le cas dans nos expériences, le pouvoir diffusant prend les formes simples suivantes :

$$P_1 = \frac{X^2 f^2 H^2}{4Zm} \left[4 \frac{E_{AL}}{\sqrt{2}_{AL}} \cos^2 \frac{\varphi_L}{2} + 4 \frac{E_{OL}}{\sqrt{2}_{OL}} \sin^2 \frac{\varphi_L}{2} \right]$$ pour les ondes longitudinales,

$$P_1 = \frac{X^2 f^2 H^2}{4Zm}\left[\left(4\frac{E_{AT}}{\nu^2_{AT}}\cos^2\frac{\varphi_T}{2} + 4\frac{E_{OT}}{\nu^2_{OT}}\sin^2\frac{\varphi_T}{2}\right)\cos^2\alpha + \left(4\frac{E_{AL}}{\nu^2_{AL}}\cos^2\frac{\varphi_L}{2} + 4\frac{E_{OL}}{\nu^2_{OL}}\sin^2\frac{\varphi_L}{2}\right)\sin^2\alpha\right]$$

pour les ondes transversales

On voit que les expressions du pouvoir diffusant contiennent trois grandeurs inconnues indépendantes :

les deux fréquences ν_{AL}, ν_{OL} et la phase φ_L, pour les oscillations longitudinales, et pour les oscillations transversales, les deux fréquences ν_{AT}, ν_{OT}, et la phase φ_T, la contribution des ondes longitudinales n'intervenant que comme terme correctif.

Pour résoudre le problème, il faudrait donc mesurer le pouvoir diffusant en trois points homologues qui se rapportent dans l'espace réciproque aux mêmes oscillations harmoniques des atomes ; Mériel (17) a montré que les résultats d'une telle méthode étaient décevants du fait de la précision limitée des mesures photométriques. Aussi utilisons-nous la méthode suivante :

Nous prenons pour valeurs des phases celles qui sont calculées avec notre matrice de Fourier déterminée à partir de 4 paramètres connus ; et nous partageons le pouvoir diffusant P_1 mesuré entre les oscillations acoustiques et les oscillations optiques selon le rapport trouvé entre les amplitudes de ces 2 sortes d'oscillations au moyen de la même matrice de Fourier ; des deux parties du pouvoir diffusant P_1 ainsi déterminées nous déduisons deux fréquences se rapportant l'une aux oscillations acoustiques, l'autre aux oscillations optiques ; ces fréquences sont généralement différentes de celles qui ont été calculées au moyen de la matrice de Fourier définie plus haut ; elles déterminent un nouveau pouvoir diffusant et par conséquent un nouveau rapport entre les contributions apportées à la diffusion par les oscillations acoustiques et optiques ; nous avons évalué ce nouveau rapport en conservant les phases tirées de la matrice de Fourier ; nous répétons l'opération précédente jusqu'à ce que les fréquences déterminées par 2 opérations successives soient sensiblement égales.

2) Résultats expérimentaux

a) étude des oscillations se propageant suivant l'axe de symétrie quaternaire, à 293 et 580° K.

Pour étudier les oscillations longitudinales, nous avons déplacé le pôle de diffusion entre les points de coordonnées 300 et 600 du réseau

polaire. La diffusion dans la zone de centre 400 est dûe aux seules oscillations acoustiques et, par suite, les mesures effectuées dans cette zone déterminent les fréquences des oscillations acoustiques.

Au contraire, les mesures effectuées dans la zone de centre 600 permettent de déterminer les fréquences des oscillations optiques.

En déplaçant le pôle de diffusion entre les noeuds 600 et 620 sur l'axe de symétrie quaternaire, nous avons déterminé les fréquences des oscillations transversales optiques d'après les mesures effectuées dans la zone de centre 600, et les fréquences des oscillations transversales acoustiques d'après les mesures effectuées dans la zone de centre 620.

Les résultats sont rassemblés dans les tableaux suivants. Les coordonnées du pôle de diffusion correspondant à chaque photométrie sont notées k_1, k_2, k_3.

P est le pouvoir diffusant total mesuré ;

P_c le pouvoir diffusant par effet Compton, que nous avons mesuré à la température de 77° K ;

$P_{therm.}$ le pouvoir diffusant global d'agitation thermique ;

P_{lm} le pouvoir diffusant moyen d'ordre 1 rapporté au domaine de divergence et obtenu en retranchant P_2 de $P_{therm.}$

P_{lv} le pouvoir diffusant d'ordre 1 déterminé en effectuant sur P_{lm} les corrections de divergence.

ν sont les fréquences des oscillations.

$\vec{S}$// [100] oscillations longitudinales $\vec{X}$ (k, 0, 0)

k	P	P_c	P_{therm}	P_{lm}	P_{lv}	$\nu_{AL}.10^{-12}$s	$\nu_{OL}.10^{-12}$s	
3	0,517	0,390	0,127	0,124	0,124	12,4	12,4	
3 + 1/6	0,573	0,402	0,171	0,165	0,165	10,4		
3 + 1/3	0,653	0,414	0,239	0,228	0,228	9,4		
3 + 1/2	0,808	0,426	0,382	0,363	0,351	7,1		
3 + 2/3	1,241	0,438	0,803	0,770	0,711	4,9		
4	-	-	-	-	-			T=293°
4 + 1/3	1,404	0,486	0,918	0,864	0,778	5,1		
4 + 1/2	0,974	0,496	0,478	0,440	0,431	7,1		
4 + 2/3	0,802	0,508	0,294	0,267	0,267	9,2		
4 + 5/6	0,765	0,519	0,246	0,226	0,226	10,5		
5	0,732	0,531	0,201	0,186	0,186	12,0	12,0	
5 + 1/6	0,730	0,540	0,190	0,179	0,179		12,4	
5 + 1/3	0,715	0,552	0,163	0,155	0,155		13,7	
5 + 1/2	0,715	0,565	0,150	0,144	0,144		14,4	
5 + 2/3	0,713	0,576	0,137	0,132	0,132		14,4	
5 + 5/6	0,722	0,586	0,136	0,132	0,132		15,3	
6	0,728	0,597	0,131	0,127	0,127		15,7	
6 + 1/6	0,743	0,608	0,135	0,135	0,135		15,0	

$\vec{S}$// [100] oscillations longitudinales $\vec{X}$ (k, 0, 0)

k	P	P_c	$P_{therm.}$	P_{lm}	P_{lv}	$\nu_{AL} \cdot 10^{-12}$s	$\nu_{OL} \cdot 10^{-12}$s	
3	0,646	0,390	0,256	0,244	0,244	10,6	10,6	
3 + 1/6	0,755	0,402	0,353	0,330	0,330	9,2		
3 + 1/3	0,954	0,414	0,540	0,501	0,501	7,7		
3 + 1/2	1,291	0,426	0,865	0,793	0,776	6,2		
3 + 2/3	2,114	0,438	1,676	1,546	1,441	4,6		
4	–	–	–	–	–			T=580° K
4 + 1/3	2,319	0,486	1,833	1,635	1,534	4,7		
4 + 1/2	1,481	0,496	0,985	0,847	0,823	6,6		
4 + 2/3	1,147	0,508	0,639	0,544	0,544	8,2		
4 + 5/6	0,963	0,519	0,444	0,380	0,380	10,0		
5	0,903	0,531	0,372	0,326	0,326	10,4	10,4	
5 + 1/6	0,834	0,540	0,294	0,263	0,263		12,3	
5 + 1/3	0,811	0,552	0,259	0,239	0,239		12,9	
5 + 1/2	0,787	0,565	0,222	0,208	0,208		14,0	
5 + 2/3	0,784	0,576	0,208	0,197	0,197		14,4	
5 + 5/6	0,785	0,586	0,199	0,192	0,192		14,4	
6	0,787	0,597	0,190	0,184	0,184		14,7	

$\vec{S}$// [100.] oscillations transversales $\vec{X}$ (6 , k, 0)

k	P	P_c	$P_{therm.}$	P_{lv}	$\nu_{AT} \cdot 10^{-12}$s	$\nu_{OT} \cdot 10^{-12}$s	
1/6	0,765	0,598	0,167	0,162		16,1	
1/3	0,793	0,599	0,194	0,188		15,3	
1/2	0,830	0,599	0,231	0,224		15,2	
2/3	0,877	0,600	0,277	0,267		15,1	
5/6	0,987	0,601	0,386	0,373			
1	1,102	0,602	0,500	0,477	5,2		
7/6	1,177	0,603	0,574	0,541	5,5		T=293° K
4/3	1,420	0,606	0,814	0,764	4,8		
3/2	1,832	0,609	1,223	1,151	4,1		
5/3	2,520	0,613	1,907	1,772	3,35		
11/6	7,929	0,617	7,312	7,074	1,69		
2	–	–	–	–			
1/6	0,881	0,598	0,283	0,274		14,5	
1/3	0,909	0,599	0,310	0,298		14,0	
1/2	0,973	0,599	0,374	0,357		13,0	
2/3	1,061	0,600	0,461	0,433		13,1	
5/6	1,201	0,601	0,600	0,561			
1	1,438	0,602	0,836	0,768	5,1		T=580° K
7/6	1,591	0,603	0,988	0,879	5,3		
4/3	1,842	0,606	1,236	1,076	5,2		
3/2	2,498	0,609	1,889	1,649	4,3		
5/3	4,113	0,613	3,500	2,992	3,35		
11/6	12,521	0,617	11,904	11,102	1,70		
2	–	–	–	–	–		

b) étude des oscillations se propageant suivant l'axe de symétrie ternaire à 293° K et 580° K.

Pour étudier les oscillations longitudinales, nous avons déplac le pôle de diffusion X entre les points de coordonnées 5/3 5/3 5/3 et 333 du réseau polaire. Des mesures effectuées dans la zone de centre 222 où la contribution des oscillations optiques est prépondérante, nous avons déduit les fréquences des oscillations optiques ; au contraire, les mesures effectuées dans la zone de centre 333 où la contribution des oscillations acoustiques est prépondérantes permettent de déterminer les fréquences des oscillations acoustiques.

Dans l'étude des ondes transversales, le pôle de diffusion se déplace sur l'axe ternaire entre les noeuds 333 et 442 du réseau polaire. Dans la zone de centre 442 les ondes optiques dominent et nous avons déduit des mesures dans cette zone les fréquences des oscillations optiques. Les résultats sont rassemblés dans les tableaux suivants :

$\vec{S}$ // [111]. oscillations longitudinales $\vec{X}$ (k,k,k)

k	P	P_c	P_{therm}	P_{lm}	P_{lv}	$\nu_{AL}.10^{-12}$s	$\nu_{OL}.10^{-12}$s	
2 - 1/3	0,502	0,384	0,118	0,117	0,117		13,6	
2 - 1/4	0,506	0,395	0,111	0,110	0,110		14,8	
2 - 1/6	0,515	0,404	0,111	0,110	0,110		15,4	
2 - 1/12	0,526	0,414	0,112	0,111	0,111		15,8	
2	-	-	-	-	-		-	
2 + 1/12	0,572	0,434	0,138	0,137	0,137		14,5	
2 + 1/6	0,589	0,444	0,145	0,144	0,144		14,3	T=293° K
2 + 1/4	0,600	0,452	0,148	0,146	0,146		14,4	
2 + 1/3	0,628	0,464	0,164	0,160	0,160		13,7	
2 + 5/12	0,663	0,474	0,189	0,182	0,182	9,7	13,1	
2 + 1/2	0,707	0,484	0,223	0,210	0,210	10,3		
3 - 5/12	0,762	0,495	0,267	0,249	0,249	9,7		
3 - 1/3	0,831	0,505	0,326	0,297	0,297	8,6		
3 - 1/4	0,977	0,513	0,464	0,419	0,411	6,8		
3 - 1/6	1,322	0,524	0,798	0,725	0,664	4,9		
3	-	-	-	-	-	-		

$\vec{S}$ // [111]. oscillations longitudinales $\vec{X}$ (k, k, k)

k	P	P_c	P_{therm}	P_{lm}	P_{lv}	$\nu_{AL}.10^{-12}$s	$\nu_{OL}.10^{-12}$s	
2 - 1/4	0,588	0,395	0,193	0,189	0,189		14,0	
2 - 1/6	0,599	0,404	0,195	0,192	0,192		14,7	
2-1/12	0,592	0,414	0,178	0,176	0,176		15,6	
2	-	-	-	-	-		-	
2+1/12	0,669	0,434	0,235	0,232	0,232		13,9	
2 + 1/6	0,707	0,444	0,263	0,259	0,259		13,4	
2 + 1/4	0,706	0,452	0,254	0,247	0,247		13,5	
2 + 1/3	0,765	0,464	0,301	0,289	0,289		12,6	
2+5/12	0,871	0,474	0,397	0,371	0,371			
2 + 1/2	0,943	0,484	0,459	0,414	0,414	9,2		T=580° K
3-5/12	1,059	0,495	0,564	0,498	0,498	8,6		
3 - 1/3	1,233	0,505	0,728	0,631	0,631	7,4		
3 - 1/4	1,529	0,513	1,016	0,862	0,852	6,0		
3 - 1/6	2,101	0,524	1,577	1,328	1,257	4,6		
3	-	-	-	-	-	-		

$\vec{S}$ // [111.] oscillations transversales $\vec{X}$ (3+k, 3+k, 3-k)

k	P	P_c	P_{therm}	P_{lv}	$\nu_{AT}.10^{-12}$s	$\nu_{OT}.10^{-12}$s	
1/12	6,557	0,547	6,010	5,860	1,30		
1/6	1,576	0,551	1,025	0,935	2,6		
1/4	1,151	0,556	0,595	0,530	3,3		
1/3	0,982	0,560	0,422	0,377	3,5		
5/12	0,894	0,564	0,330	0,298	3,6		
1/2	0,835	0,568	0,267	0,242	3,8	14,6	
7/12	0,785	0,572	0,213	0,196		16,0	T=293° K
2/3	0,757	0,578	0,179	0,169		16,4	
3/4	0,749	0,582	0,167	0,160		15,9	
5/6	0,736	0,588	0,148	0,143		15,9	
11/12	0,729	0,592	0,137	0,133		16,0	
1	0,718	0,597	0,121	0,117		16,1	
1/12	10,358	0,547	9,811	9,331	1,28		
1/6	2,762	0,551	2,211	1,896	2,55		
1/4	1,672	0,556	1,116	0,916	3,20		
1/3	1,420	0,560	0,860	0,720	3,25		
5/12	1,230	0,564	0,666	0,564	3,3		
1/2	1,138	0,568	0,570	0,498	3,0	13,7	
7/12	0,987	0,572	0,415	0,365		14,0	T=580° K
2/3	0,920	0,578	0,342	0,310		14,2	
3/4	0,857	0,582	0,275	0,254		14,5	
5/6	0,828	0,588	0,240	0,228		14,6	
11/12	0,803	0,592	0,211	0,202		14,6	
1	0,791	0,597	0,194	0,187		14,5	

Les figures suivantes (Fig. 23-24-25-26) représentent les variations du pouvoir diffusant P_1 mesuré en fonction de $\vec{X}$, aux températures de 293 et 580° K.

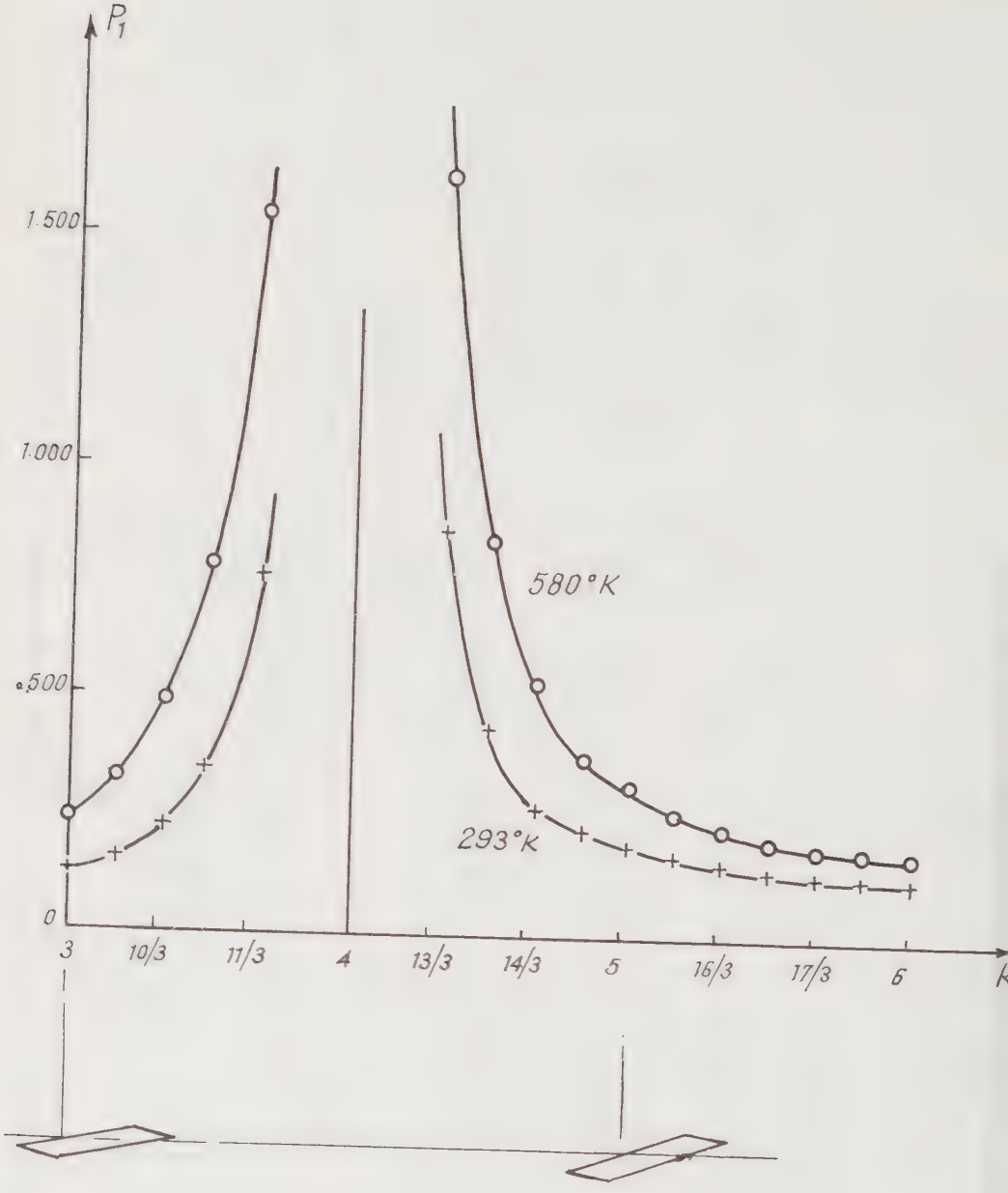


Fig. 23 - pouvoir diffusant P_1 des oscillations longitudinales se propageant suivant l'axe de symétrie quaternaire. $\vec{X}$ (k, 0, 0).

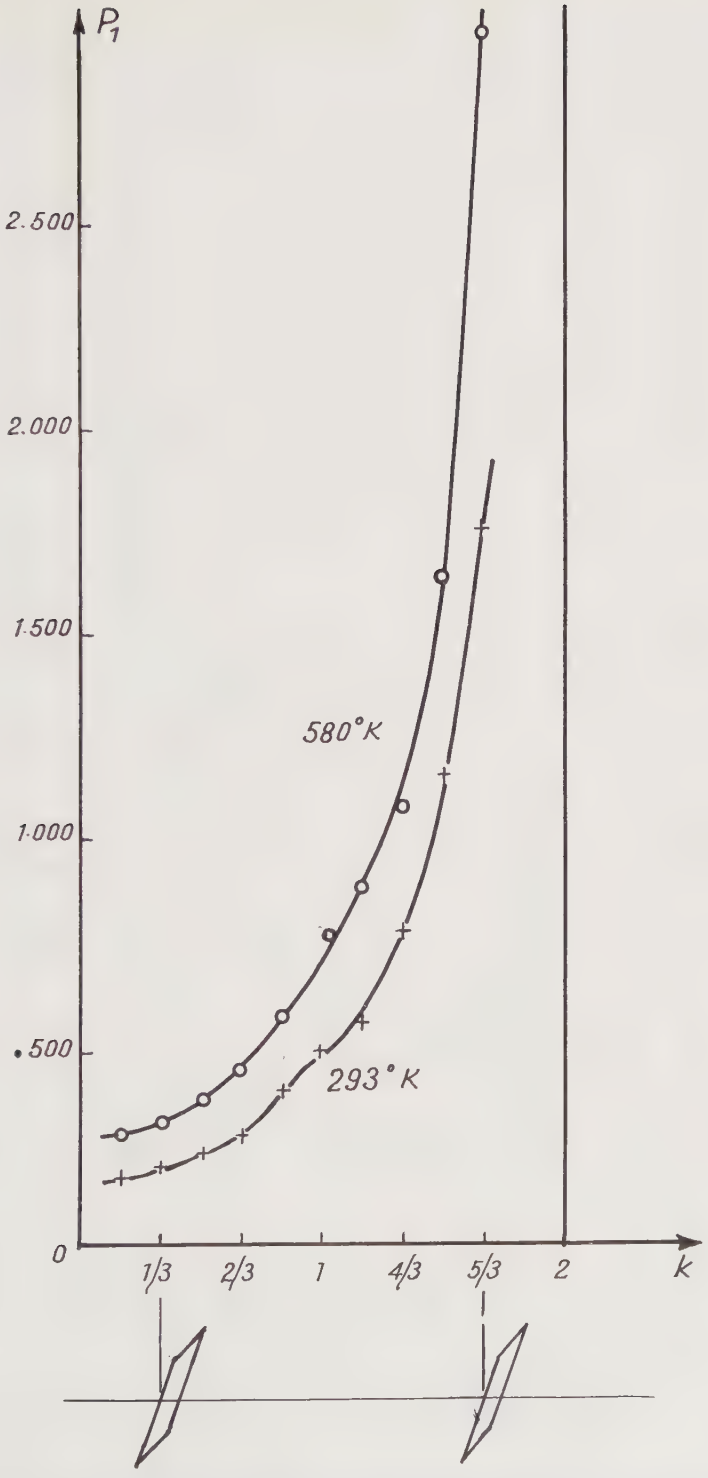


Fig. 24 - pouvoir diffusant P_1 des oscillations transversales se propageant suivant l'axe de symétrie quaternaire. $\vec{X}$ (6, k, 0).

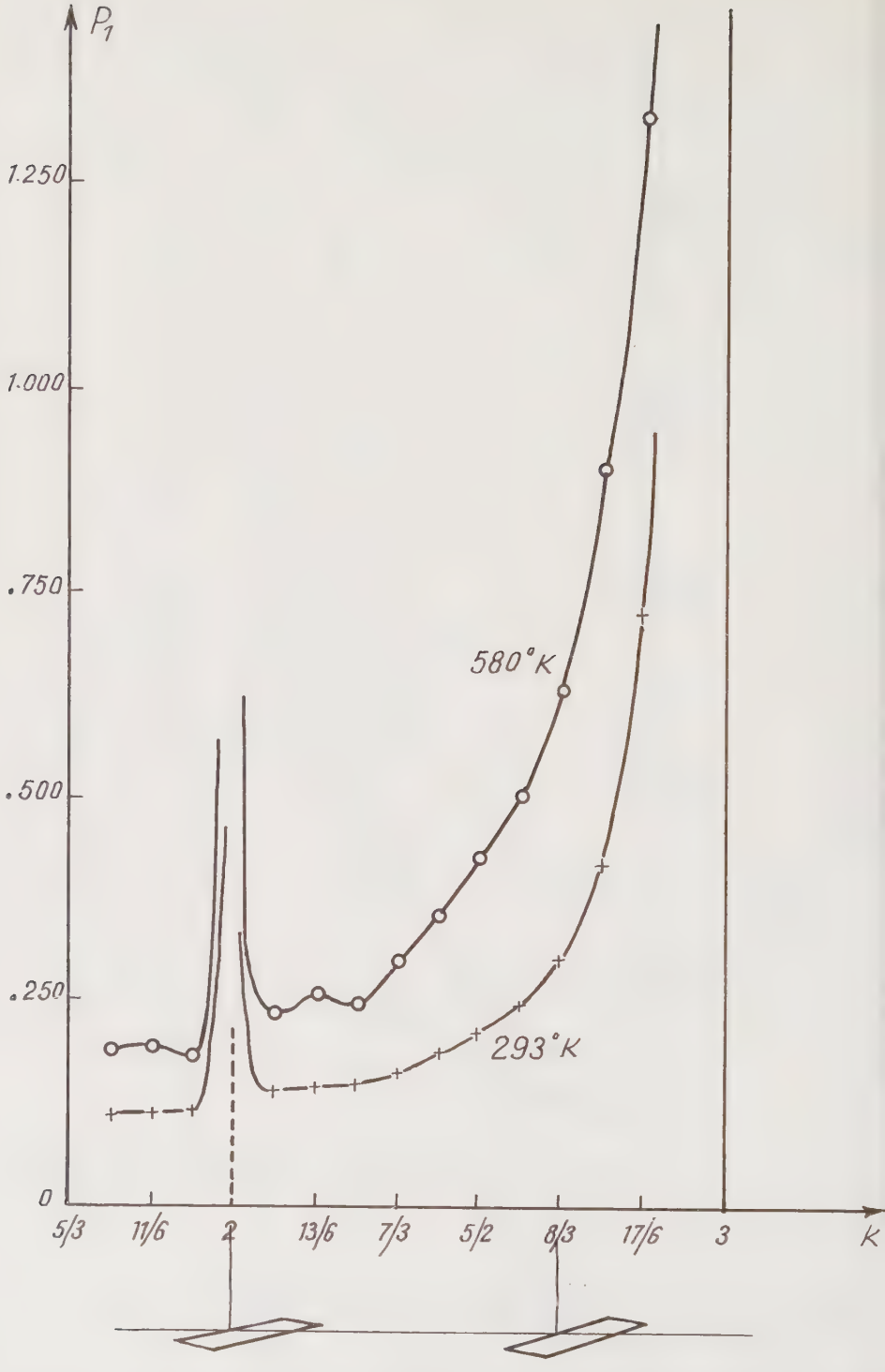


Fig. 25 – pouvoir diffusant P_1 des oscillations longitudinales se propageant suivant l'axe de symétrie ternaire. $\vec{X}$ (k, k, k).

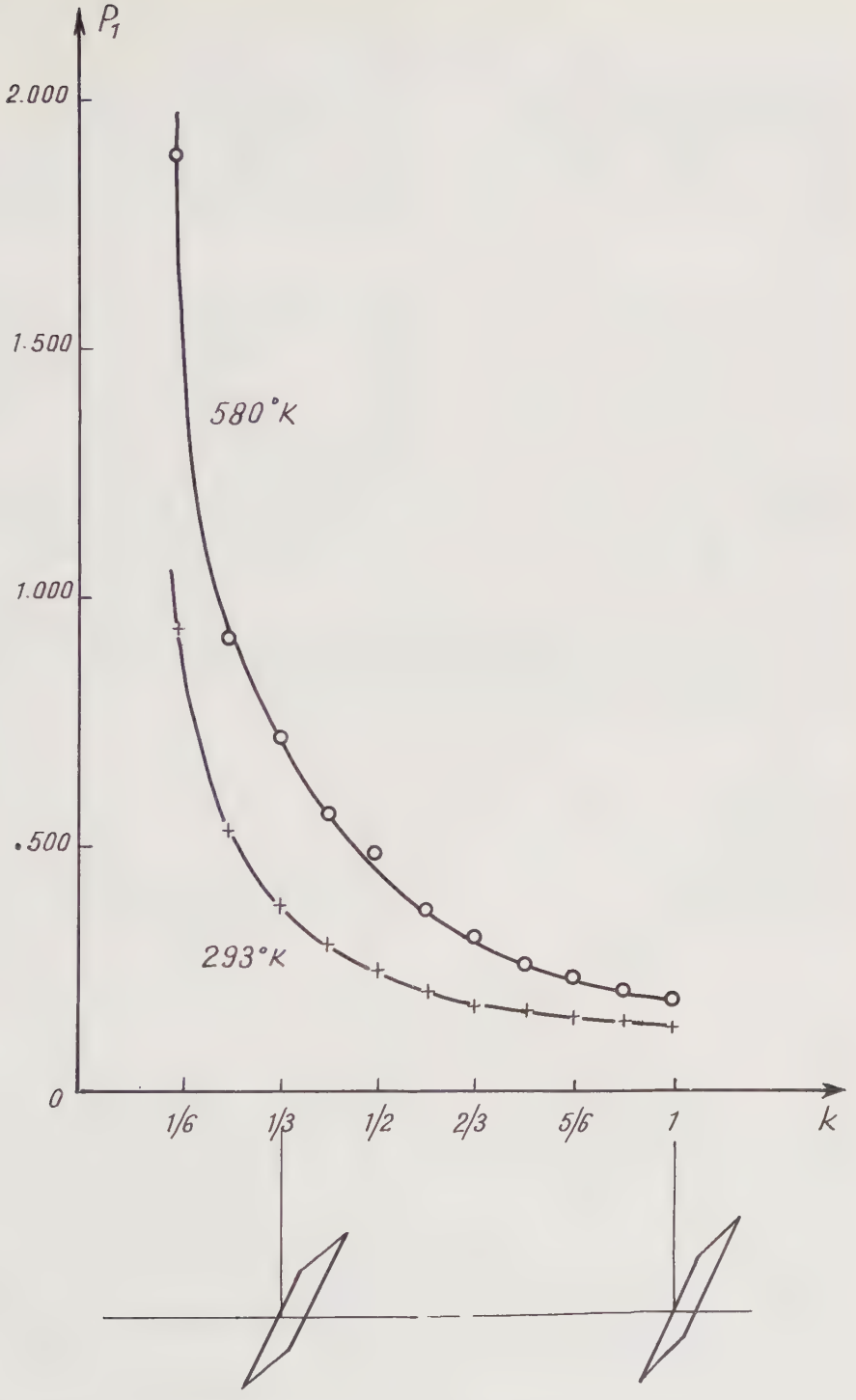


Fig. 26 – pouvoir diffusant P_1 des oscillations transversales se propageant suivant l'axe de symétrie ternaire. $\vec{X}$ (3+k, 3+k, 3-k).

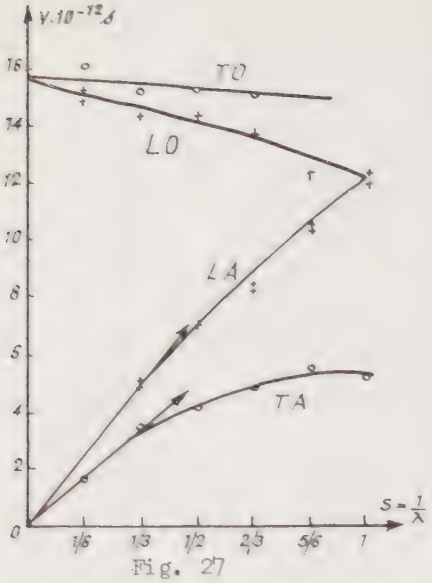


Fig. 27

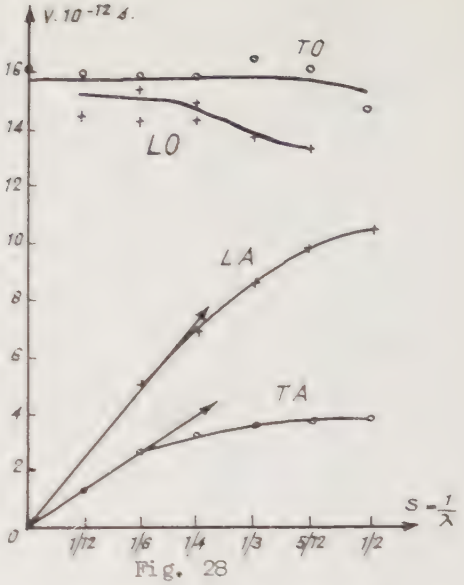


Fig. 28

Courbes de dispersion des fréquences des oscillations se propageant dans le silicium suivant les axes de symétrie quaternaire (Fig. 27) et ternaire (Fig. 28) à la température de 293° K.

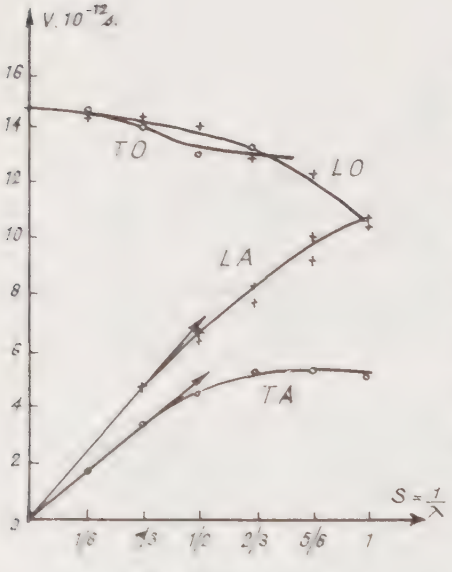


Fig. 29

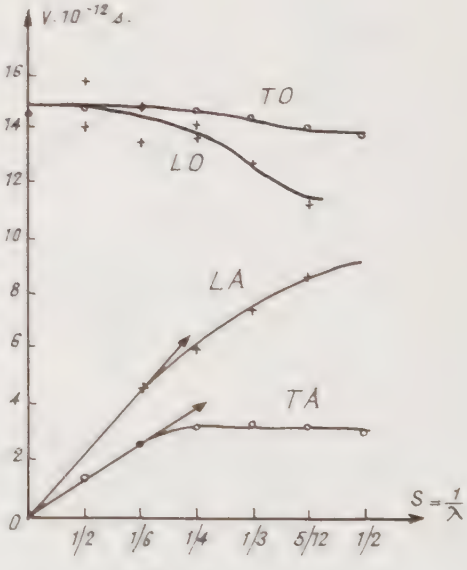


Fig. 30

Courbes de dispersion des fréquences des oscillations se propageant dans le silicium suivant les axes de symétrie quaternaire (Fig. 29) et ternaire (Fig. 30) à la température de 580° K'

3) Observations sur les résultats obtenus.

a) remarque sur les pouvoirs diffusants mesurés.

Entre la température ordinaire et 580° K, les pouvoirs diffusants P_1 augmentent en moyenne de 50 %, ce qui, nous l'avons vu, permet une meilleure détermination des fréquences à haute température, pourvu que la contribution du pouvoir diffusant d'ordre 2 soit peu importante, ce qui est le cas à 580° K.

D'autre part, on voit que la diffusion mesurée au noeud (222) du réseau polaire est anormalement élevée ; en effet (222) est une réflexion interdite dans le silicium et le pouvoir diffusant P_1 calculé en ce point est 0,098 à 293° K ; or celui que nous avons mesuré est environ cent fois plus grand ; ceci s'explique en considérant que dans les cristaux du type silicium les quatre électrons de valence se répartissent suivant quatre liaisons covalentes en position tétraédrique ; ceci entraîne une asphéricité dans la densité électronique et par suite dans les facteurs de structure (27) ; par exemple les réflexions (h,h,h) où h=4n-2 (n entier) qui sont normalement interdites à cause de la symétrie cristalline - dans le cas où l'on considère que la densité électronique dans le cristal est la superposition des densités dans les atomes isolés - donnent lieu à une diffusion assez importante ; nous l'avons observée au noeud 222 du réseau polaire ; et les mesures effectuées en ce point ne nous ont pas permis d'obtenir des renseignements sur les fréquences des oscillations thermiques correspondantes. Au contraire, par raison de symétrie, les réflexions (h,o,o) où h=4n-2 (n entier) restent interdites, même si l'on prend en compte l'asphéricité du facteur de structure ; ainsi nous avons observé une diffusion normale au noeud 600 du réseau polaire due aux oscillations thermiques de haute fréquence dont le vecteur d'onde est très petit par rapport à tous les rayons d'une première zone.

b) précision sur les fréquences des oscillations.

Nous avons vu que le pouvoir diffusant total P était mesuré à 4 % près ; la précision sur P_1 qui en résulte dépend de plusieurs facteurs : A une température donnée les basses fréquences dont la diffusion est forte, sont déterminées avec plus de précision que les hautes fréquences ; d'autre part, le pouvoir diffusant P_1 est la somme des pouvoirs diffusants P_{1ac} dû aux oscillations acoustiques de P_{1op} dû aux oscillations optiques : $P_1=P_{1ac}+P_{1op}$; or, en ce qui concerne les oscillations de petit vecteur d'onde, un terme de cette somme est nettement prépondérant et la précision obtenue sur P_{1ac} ou P_{1op} est voisine de celle obtenue sur P_1 ; au contraire, dans le domaine des moyens et grands vecteurs d'onde, le terme le plus faible de la somme n'est pas négligeable et peut atteindre le tiers de l'autre ; la précision que nous obtenons sur P_{1ac} ou P_{1op} en est considérablement affaiblie.

lorsque la température s'élève, la contribution de P_1 au pouvoir diffusant total augmente, ce qui améliore la détermination des fréquences. De plus, une erreur donnée effectuée sur P_1 entraîne sur les fréquences une erreur d'autant plus faible que la température est plus haute. Mais, au voisinage des réflexions de Bragg, la contribution de P_2 augmente, ce qui diminue la précision.

Le tableau suivant résume les résultats obtenus :

	293 °K			93 °K		
	$\frac{\Delta P_1}{P_1}$	$\left(\frac{\Delta P_1}{P_1}\right)$ ac. ou op.	$\frac{\Delta \nu'}{\nu'}$	$\frac{\Delta P_1}{P_1}$	$\left(\frac{\Delta P_1}{P_1}\right)$ ac. ou op.	$\frac{\Delta \nu'}{\nu'}$
Osc. transversales acoustiques de petit vecteur d'onde	8 %	8 %	6 %	8 %	8 %	7 %
Osc. longitudinales acoustiques de petit vecteur d'onde	12 %	12 %	7 %	10 %	10 %	7 %
Osc. acoustiques de moyen et grand vecteur d'onde	15 %	20 %	15 %	12 %	18 %	12 %
Osc. optiques de petit vecteur d'onde	10 %	10 %	12 %	12 %	12 %	8 %
Osc. optiques de moyen et grand vecteur d'onde	10 %	20 %	15 %	12 %	10 %	10 %

c) Comparaison avec d'autres résultats expérimentaux obtenus pour le silicium.

L'étude de la diffusion inélastique des neutrons par le silicium a été effectuée au Canada par Brockhouse [18] en 1960 puis plus récemment par Dolling [28] ; Brockhouse a déterminé par cette méthode les fréquences des oscillations thermiques qui se propagent dans le silicium à la température ordinaire suivant l'axe de symétrie quaternaire. Il trouve pour fréquence principale $15,5 \cdot 10^{12} s^{-1}$; alors que la valeur que nous avons déterminée est $15,7 \cdot 10^{12} s^{-1}$; les courbes de dispersion que nous avons obtenues sont en bon accord avec ses résultats, en ce qui concerne les oscillations longitudinales acoustiques et optiques. Des différences sensibles (7 et 15 %) apparaissent pour les oscillations transversales optiques et acoustiques dont le vecteur d'onde est voisin du rayon de la zone de brillouin ; mais nous venons de voir que dans ce cas, la précision que nous obtenons sur les fréquences n'est que de 15 %.

Les mesures de Dolling se rapportent à des oscillations se propageant suivant les axes de symétrie quaternaire, ternaire et binaire à 293° K ; les fréquences qu'il obtient suivant l'axe de symétrie quaternaire confirment en général, les résultats de Brockhouse.

Si nous considérons les oscillations dont le vecteur d'onde est dirigé suivant l'axe de symétrie ternaire, nous obtenons un bon accord avec les résultats de Dolling pour les oscillations transversales acoustiques et optiques et les oscillations longitudinales optiques ; mais les fréquences des oscillations longitudinales acoustiques que nous avons mesurées sont inférieures de 10 % à celles obtenues par Dolling, lorsque leur vecteur d'onde fondamental atteint son plus grand module dans la direction considérée. Mais rappelons que nous avons déterminé ces fréquences à 15 % près.

En résumé, l'accord entre les résultats de nos mesures et ceux obtenus par diffusion des neutrons est toujours très bon pour les oscillations dont le vecteur d'onde n'excède pas la moitié du rayon de la zone de Brillouin. Les divergences, lorsqu'elles existent, apparaissent pour les oscillations de grand vecteur d'onde ; or, nous avons vu que dans ce dernier cas, l'interprétation des mesures est particulièrement délicate et que la précision que nous obtenons sur les fréquences est de l'ordre de 15 % à 293° K.

Les pentes des courbes de dispersion des oscillations acoustiques, longitudinales et transversales, donnent une mesure de la vitesse de propagation des ondes sonores dans le silicium ; nous avons comparé nos résultats avec les vitesses obtenues par McSkimin (7), d'après la méthode des échos ultrasoniques.

T = 293° K	$\vec{\zeta}$ // [100]		$\vec{\zeta}$ // [111]	
	v_{LA}	v_{TA}	v_{LA}	v_{TA}
Vitesses déduites de nos courbes de dispersion	$8,5.10^5$ cm/s	$5,5.10^5$ cm/s	$9,2.10^5$ cm/s	$4,3.10^5$ cm/s
vitesses mesurées par McSkimin	8,43 "	5,8 "	9,4 "	5,0 "

Les oscillations qui entrent en compte dans la détermination de ces vitesses ont des fréquences faibles, aussi les avons nous déterminées avec une assez bonne précision (6 et 7 %), compatible avec les résultats de McSkimin.

d) variation des fréquences avec la température

Les deux séries de mesures effectuées à 295°K et 580°K, montrent que, lorsque la température s'élève, les fréquences diminuent en général.

Ainsi, la fréquence principale varie de $15,7.10^{12} s^{-1}$, à 295°K, à $14,7.10^{12} s^{-1}$ à 580°K, subissant un abaissement de 7 % ; c'est l'ordre de grandeur moyen de l'affaiblissement des fréquences des oscillations optiques que nous avons déterminées.

Les oscillations acoustiques sont affectées différemment suivant leur polarisation : ainsi les fréquences des oscillations longitudinales de faible vecteur d'onde, que nous déterminons avec plus de précision que celles des oscillations de grand vecteur d'onde, subissent une diminution de l'ordre de 8 % alors que les oscillations transversales voient leurs fréquences s'abaisser de 2 % seulement environ.

D'autre part, nous remarquons que la forme des courbes de dispersion des oscillations optiques longitudinales et transversales se propageant suivant l'axe de symétrie quaternaire est différente à 295°K et à 580°K : à 580°K, les oscillations transversales optiques dont le vecteur d'onde varie entre le 1/5 et les 2/5 du rayon de la zone de Brillouin ont des fréquences inférieures à celles des oscillations longitudinales optiques. Or Dolling, grâce à la diffusion des neutrons, a observé ce phénomène à la température ordinaire : des calculs de fréquences effectués à partir d'un modèle de champ de forces tenant compte de la polarisation des atomes (Mucher [12], Dolling [28], ont prévu également cette inversion des fréquences optiques : nous ne l'avons observée qu'à 580°K ; mais, nous l'avons vu, les mesures effectuées à cette température sont plus précises : les fréquences optiques sont en effet déterminées à 9 % près environ à 580°K et seulement à 14 % près à 295°K.

e) tentatives pour déterminer les constantes de forces interatomiques.

Nous avons calculé précédemment les courbes de dispersion des oscillations thermiques dans le silicium, afin de pouvoir évaluer a priori les pouvoirs diffusants ; nous avons pour cela décrit le champ de forces cristallin par un champ de forces agissant à courte distance entre atomes ponctuels ; nous avons déterminé de cette manière les constantes interatomiques suivantes :

$\alpha_1 = 5,35 \cdot 10^4$ dynes. cm^{-1}
$\beta_1 = 3,83 \cdot 10^4$ dynes. cm^{-1}, pour les premiers voisins,
$\alpha_2 = 0,171 \cdot 10^4$ " " pour les deuxièmes " ,
$\alpha_3 = 0,029 \cdot 10^4$ " " pour les troisièmes " ,

Les fréquences $\nu_{TA_{100}}$ et $\nu_{TA_{111}}$ des oscillations transversales acoustiques se propageant suivant les axes de symétrie quaternaire et ternaire, calculées à partir de ces constantes interatomiques, sont en désaccord avec nos expériences : l'écart atteint 30 % pour les oscillations de vecteu

d'onde fondamental maximum :

$\nu_{TA_{100}}$ calculée $= 7,1 \cdot 10^{12} s^{-1}$ $\quad \nu_{TA_{111}}$ calculée $= 5,35 \cdot 10^{12} s^{-1}$

$\nu_{TA_{100}}$ mesurée $= 5,4 \cdot 10^{12} s^{-1}$ $\quad \nu_{TA_{111}}$ mesurée $= 3,7 \cdot 10^{12} s^{-1}$

Le désaccord ne peut être imputé aux erreurs expérimentales ; les autres fréquences calculées sont en bon accord avec l'expérience.

Or, nous avons calculé ces fréquences à partir des trois constantes élastiques C_{11}, C_{12}, C_{44} et de la fréquence principale ν_o. On peut penser que si l'on ajoute deux nouvelles données expérimentales dans le calcul des fréquences, et à condition que ces deux nouvelles données soient justement les deux fréquences $\nu_{TA_{100}}$ et $\nu_{TA_{111}}$ des oscillations de vecteur d'onde maximal, les courbes de dispersion des oscillations transversales acoustiques calculées tendront à se superposer aux courbes expérimentales.

Nous avons donc calculé de nouvelles courbes de dispersion à partir des 6 données expérimentales suivantes : C_{11}, C_{12}, C_{44}, ν_o et $\nu_{TA_{100}}$, $\nu_{TA_{111}}$; nous avons pour cela pris en compte les interactions s'exerçant entre un atome et ses premiers, deuxièmes et troisièmes voisins, en supposant les forces centrales pour ces derniers.

α_1, β_1 étant les constantes de forces relatives aux interactions entre 1ers voisins,

α_2, β_2, γ_2 les constantes relatives aux interactions entre 2es voisins,

et α_3 celle relative aux interactions entre 3es voisins.

La résolution du système

$$dc_{11} = \alpha_1 + 8\alpha_2 + 83\alpha_3$$

$$dc_{12} = -\alpha_1 + 2\beta_1 - 4\alpha_2 - 4\beta_2 + 8\gamma_2 + 19\alpha_3$$

$$dc_{44} = \alpha_1 + 4\alpha_2 + 4\beta_2 + 19\alpha_3 - \frac{(\beta_1 - 9\alpha_3)^2}{\alpha_1 + 11\alpha_3}$$

$$m\,\pi^2 \nu^2_{TA_{100}} = \alpha_1 - \beta_1 + 2\alpha_2 + 2\beta_2 + 16\alpha_3$$

$$2m\,\pi^2 \nu^2_{TA_{111}} = \alpha_1 - \beta_1 + 4\alpha_2 + 2\beta_2 - 2\gamma_2 + 28\alpha_3$$

$$m\,\pi^2 \nu_o^2 = 2\,(\alpha_1 + 11\alpha_3)$$

détermine des constantes de forces imaginaires lorsqu'on y remplace $\nu_{TA_{100}}$ et $\nu_{TA_{111}}$ par les fréquences mesurées : 5,4 et $3,7.10^{12} s^{-1}$. Si à la place

des fréquences théoriques que donne ce modèle $\nu_{TA_{100}} = 7,1$ et $\nu_{TA_{111}} = 5,5.10^{12} s^{-1}$, on choisit des fréquences plus basses pour résoudre le système précédent, à partir des valeurs $\nu_{TA_{100}} = 3,8$ et $\nu_{TA_{111}} = 3,2.10^{12} s^{-1}$ le système détermine des constantes interatomiques imaginaires.

Ce modèle est donc incapable de rendre compte de la faible valeur des fréquences des oscillations transversales acoustiques, lorsque l'on calcule les fréquences à partir des données expérimentales précédentes.

Nous avons effectué une seconde tentative pour déterminer les constantes interatomiques : nous avons pris en compte les actions s'exerçant entre un atome et ses voisins jusqu'aux 5es, en supposant les forces centrales à partir des troisièmes voisins ; huit constantes de forces rendent compte de ces actions : nous les avons déterminées à partir de la fréquence principale et de 7 fréquences d'oscillations de vecteur d'onde maximal qui se propagent suivant les axes de symétrie quaternaire et ternaire ; les résultats obtenus sont les suivants :

$\alpha_1 = 3,39 . 10^4$	dynes.	cm^{-1}	(constantes de forces relatives aux 1ers voisins)
$\beta_1 = 4,07$	"	"	
$\alpha_2 = 0,292$	"	"	(2es voisins)
$\beta_2 = -0,202$	"	"	
$\gamma_2 = 0,580$	"	"	
$\alpha_3 = -0,010$	"	"	(3es voisins)
$\alpha_4 = -4,51$	"	"	(4es voisins)
$\alpha_5 = 0,126$	"	"	(5es voisins)

Nous voyons que la constante de force relative aux 4es voisins est anormalement forte ; de plus des calculs effectués à partir de ces 8 constantes conduisent à des fréquences d'oscillations imaginaires.

Enfin, nous avons tenté de calculer les fréquences à partir des valeurs expérimentales de 7 fréquences d'oscillations de vecteur d'onde maximal ; nous avons ainsi déterminé une fréquence principale ν_0 15,4. $10^{12} s^{-1}$ alors que la valeur expérimentale est 15,7. $10^{12} s^{-1}$.

En résumé, toutes les tentatives effectuées pour décrire les interactions entre atomes dans le silicium par un modèle de champ de forces s'exerçant à courte distance entre atomes ponctuels ont échoué. Herman [20] est parvenu avec un modèle analogue à remonter des fréquences des oscillations thermiques mesurées dans le germanium par Brockhouse aux constantes de forces interatomiques ; mais pour obtenir des résultats satisfaisants, il a dû faire appel aux interactions entre un atome et ses 5es voisins ; il introduit ainsi 19 constantes de forces et par suite 19 données expérimentales sont nécessaires à leur détermination ; mais un modèle qui réclame

tant de paramètres pour rendre compte des faits ne peut être considéré comme satisfaisant.

Nous avons pu déterminer directement la contribution des différents voisins d'un atome à la force globale agissant sur cet atome : en effet, l'équation qui permet de calculer les fréquences des oscillations longitudinales se propageant suivant l'axe de symétrie quaternaire a une forme particulièrement simple ; elle s'écrit (1) :

$$m.\pi^2.\nu^2 = (\alpha_1 + 2\alpha_2 + 2\alpha_3 + \beta_3 + \frac{\beta_4}{2} + 2\alpha_5 + 2\alpha_5 + 4\alpha_6 + \beta_6) - (\alpha_1 + 2\alpha_3 + \beta_5)\cos\frac{\sigma}{2}$$

$$-2(\alpha_2 + 2\alpha_4)\cos\sigma - (\beta_3 + 2\alpha_5)\cos\frac{3\sigma}{2} - (\frac{\alpha_4}{2} + 2\beta_6)\cos 2\sigma \text{ , en se limitant}$$

aux sixièmes voisins ; m est la masse de l'atome, et les α, β, δ les constantes interatomiques se rapportant aux voisins successifs d'un atome. D'autre part, nous avons fait développer en série de Fourier, la courbe expérimentale représentant les carrés des fréquences des oscillations longitudinales se propageant suivant l'axe de symétrie quaternaire en fonction du vecteur d'onde, l'expression de ce développement est :

$$(2)\quad \frac{10^{-24}}{m\pi^2}.\nu^2 = 129 - 113\cos\frac{\sigma}{2} - 11,9\cos\sigma - 5,9\cos\frac{3\sigma}{2} + 4,5\cos 2\sigma + \ldots$$

Les coefficients suivants sont respectivement :-2,55 ; 0,29 ; -1,38 ; 1,65 ; -0,43 ; -0,22 pour le dixième coefficient, 0,50 pour le 12e, 0,36 pour le 14e, 0,059 pour le 16e ; 0,20 pour le 18e ; 0,057 pour le 20e, etc...

Comparons les coefficients des équations (1) et (2) :

le terme constant fait intervenir tous les voisins d'un atome ; il est égal à ($m.\pi^2.10^{+24}.129$), soit $5,93.10^4$ dynes.cm^{-1} ; dans le terme d'ordre 1 interviennent les 1ers voisins puis ceux d'ordre impair ; il est égal à ($m.\pi^2.10^{+24}.113$) soit $5,20.10^4$ dynes.cm^{-1} ; le terme d'ordre 2 fait intervenir les 2es voisins puis les voisins d'ordre supérieur pair ; il est égal à ($m.\pi^2.10^{+24}.11,9$) soit $0,55.10^4$ dynes.cm^{-1} ; et ainsi de suite jusqu'au 4e terme qui fait intervenir au moins les 4es voisins puis ceux d'ordr pair à partir des 6es ; pour les termes d'ordre plus élevé, la règle est modifiée ; ainsi dans le terme d'ordre n, ce ne sont pas nécessairement les n^e voisins qui interviennent les premiers, ce peut-être des voisins d'ordre supérieur à n (mais jamais inférieur à n), ce qui explique la décroissance irrégulière des coefficients d'ordre élevé. Nous voyons que le terme d'ordre 2 est 10 fois plus petit que celui d'ordre 1 auquel les premiers voisins apportent la contribution la plus grande ; ensuite la décroissance est beaucoup plus lente ; le terme dordre 5 dans lequel aucun voisin d'ordre inférieur à 5 n'intervient est 45 fois plus petit que le premier.

Ce développement montre que la contribution des atomes premiers voisins à la force globale agissant sur un atome est de loin prépondérante ;

cependant, il n'est pas suffisant d'en tenir compte ; et nous avons vu qu'u modèle de champ de forces agissant à très courte distance ne pouvait rendre compte de nos résultats expérimentaux ; au contraire, les calculs de fréquences effectués à partir de champs de forces qui tiennent compte de la polarisabilité des atomes et par suite des interactions électrostatiques s'exerçant à une distance relativement grande par rapport à la distance des atomes contigus sont assez satisfaisants : les divergences entre les fréquences évaluées par Kucher et celles que nous avons mesurées ne dépassent jamais les écarts dûs aux erreurs expérimentales.

CONCLUSION

La photométrie absolue de la diffusion faible des rayons X nous a permis de déterminer les fréquences des oscillations atomiques se propageant dans un cristal de silicium suivant les axes de symétrie quaternaire et ternaire.

A l'aide d'un modèle de champ de forces du genre de ceux qui ont été pris en compte par Max Born et Von Karman nous avons pu remonter des pouvoirs diffusants mesurés aux fréquences des oscillations atomiques (Méthode de Laval).

Nous avons toujours éliminé la diffusion parasite produite par l'air en faisant le vide dans l'enceinte qui renferme le cristal. D'autre part, l'emploi d'un photoscintillateur nous a permis de mesurer des flux de rayons X diffusés très faibles.

La diffusion par effet Compton, que nous avons déduite des mesures effectuées à 77° K confirme sensiblement les calculs de Freeman.

Les courbes de dispersion des fréquences des oscillations atomiques qui se propagent dans le cristal à la température ordinaire sont en assez bon accord avec celles qui ont été obtenues par Brockhouse et Dolling au moyen de la diffusion inélastique des neutrons.

Les mesures effectuées à 580° K montrent que les oscillations sont affectées différemment, suivant leur polarisation et leur genre, par une élévation de température : les fréquences des oscillations optiques, longitudinales et transversales, et celles des oscillations longitudinales acoustiques subissent une diminution sensible, de l'ordre de 7 %, lorsque la température varie de 293 à 580° K ; au contraire, les oscillations transversales acoustiques sont très peu affectées par cette élévation de température.

Les fréquences des oscillations transversales acoustiques que nous avons mesurées sont en net désaccord avec les fréquences calculées d'après le modèle de Born et Von Karman ; les calculs de Kucher, qui ne négligent pas la polarisabilité des atomes, rendent un meilleur compte de nos expériences. Ainsi, un modèle de champ de forces tensoriel s'exerçant à très courte distance entre atomes rigides se révèle insuffisant pour décrire les interactions entre atomes dans le silicium ; il est probablement nécessaire de faire intervenir des forces électrostatiques provenant de la polarisation des atomes et dont le rayon d'action est relativement grand par rapport à la distance des atomes contigus pour obtenir un accord satisfaisant avec nos résultats expérimentaux.

SOMMAIRE

Introduction

Première Partie
Application de la théorie dynamique cristalline au silicium

A - Rappels de dynamique des réseaux
B - Application au silicium
    1 - Structure du silicium
    2 - Matrice de Fourier du silicium
    3 - Etude d'un champ de forces simplifié du silicium
    4 - Etude d'un champ de forces tenant compte de la polarisation des atomes

Deuxième Partie
La diffusion des rayons X

A - La diffusion par les ondes élastiques
    1 - Le pouvoir diffusant du premier ordre
    2 - Le pouvoir diffusant du deuxième ordre
B - La diffusion par effet Compton

Troisième Partie
Dispositif expérimental : principe de l'analyse des résultats expérimentaux.

A - Dispositif expérimental
B - Pouvoir diffusant
    1 - Son expression
    2 - Divergence des faisceaux
    3 - Précision sur le pouvoir diffusant mesuré
C - Renseignements que permet d'obtenir la diffusion
    1 - Etude des ondes longitudinales
    2 - Etude des ondes transversales
    3 - P_1 et P_2 calculés

Quatrième Partie
Résultats expérimentaux

A - Mesure de l'effet Compton
B - Fréquence des oscillations thermiques dans le silicium à 293 et 580° K
    1 - Hypothèses nécessaires à l'interprétation
    2 - Résultats expérimentaux
    3 - Observation sur les résultats obtenus

Conclusion

Bibliographie

BIBLIOGRAPHIE

1 - J. LAVAL - Bull. Soc. fr. Minéral. 62. 1939 p.137
2 - J. LAVAL - Bull. Soc. fr. Minéral. 64. 1941.p. 1
3 - M. BORN - Dynamik der Kristalgitter. 1915. Leipzig. Atomtheorie des festen Zustandes 1923. Leipzig.
4 - J. LAVAL - L'état solide (9e Congrès de Physique Solvay). Stoops. Bruxelles. 1952. p.273.
5 - N. BOCCARA - Etude de l'effet Compton et des ondes élastiques dans les cristaux de sylvine. thèse. non publiée.
6 - N. BOCCARA - Jal Phys. Radium. 23.1962 p. 921
7 - H.J. McSKIMIN. Jal. appl. Phys. 24. 1953 p.988
8 - MELVIN LAX. ELIAS BURSTEIN - Phys. Rev. 97. 1955 p.39
9 - G.G. MACFARLANE - T.P. Mc LEAN-J.E. QUARRINGTON-V. ROBERTS - Phys. Rev. 111. 1958. p.1245
10 - V.S. MASHKEVICH and K.B. TOLPYGO - Zh ETF. 32. 520 (1957) Soviet Phys. J.E.T.P.5. 1957. p.435
11 - Z.A. DEMIDENKO - T.I. KUCHER - K.B. TOLPYGO - Fizika Tverdogo Tela. 3 1961 p.2482. (Soviet Phys. Solid. State - 3 - 1962 - p. 1803).
12 - T.I. KUCHER - Fizika Tverdogo Tela - 4 1962 p.992 (Soviet Phys. Solid. State. 4' 1962 p.729).
13 - B.N. BROCKHOUSE - Phys. Rev. Letters - 2 1959 p.256
14 - B.N. BROCKHOUSE - P.K. IYENGAR - Phys. Rev. 108 1957 p.894
15 - W. COCHRAN - Proc. Roy. Soc. A.253 1959 p.260
16 - J. LAVAL - Bull. Soc. fr. Minéral 64 1941 p.1
17 - P. MERIEL - Etude des ondes élastiques dans le sel gemme - thèse non publiée.
18 - A.J. FREEMAN - Acta Cryst. 12 1959 p.274, 929
13 1960 p.190, 618
19 - J. LAVAL - thèse. Bull. Soc. fr. Minéral 62 1939 p.137
20 - H. CURIEN et C. DEROCHE.- Bull. Soc. fr. Minéral 79 1956 p.102
21 - C.B. WALKER - Phys. Rev. 103 1956. p.558
22 - D. CRIBIER - thèse - Annales de Physique - 13 (4) 1959 p.333
23 - P. OLMER - Bull. Soc. Fr. Minéral 71 1948 p.144
24 - H. CURIEN " " " " 75 1952 p. 197, 343
25 - R.B. ROOF - Phys. Rev. 113 1959 p.826
26 - A.J. FREEMAN - Acta Cryst. 12 1959 p.261
27 - G. LEMAN - thèse. Annales de Physique 7 1962
28 - G. DOLLING - Lattice Vibrations in cristals with the Diamond Structure Sept. 62 - non publié -
29 - F. HERMAN - Jal. of Phys. Chem. of solids 8 1959 p.405.

DEUXIEME THESE

Propositions données par la Faculté

"Interactions électrons phonons dans les semi-conducteurs piezoélectriques".

Vu et approuvé :
Paris, le 13 Novembre 1963

Le Doyen de la Faculté des Sciences,
Marc ZAMANSKY

Vu
et Permis d'imprimer :

Le Recteur de l'Académie
de Paris,

Jean ROCHE

IMPRIMERIE O. M. 26, RUE VAUQUELIN - PARIS 5e